

$$e=1.6021765e-19 = \mathbf{1.602e-19} \text{ C}$$

$$h=6.626069e-34 = \mathbf{6.626e-34} \text{ Js}$$

$$c=299792458 = \mathbf{2.998e+08} \text{ ms}^{-1}$$

$$m_e=9.1093821e-31 = \mathbf{9.109e-31} \text{ kg}$$

$$N_A=6.0221418e+23 = \mathbf{6.022e+23} \text{ mol}^{-1}$$

$$k=1.3806488e-23 = \mathbf{1.381e-23} \text{ JK}^{-1}$$

$$R=8.3144621 = \mathbf{8.314} \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

### 1. Boltzmannova pravděpodobnost

Molekula má třikrát degenerovaný vzbuzený stav ležící

$DE=0.12 = \mathbf{0.12} \text{ eV}$  nad nedegenerovaným základním stavem. Kolik % molekul je za teploty  $T=500 = \mathbf{500} \text{ K}$  ve vzbuzeném stavu?

% 9'51

$$DE=DE \cdot e = \mathbf{1.923e-20} \text{ J}$$

$$Q=1+3 \cdot \exp(-DE/k/T) = \mathbf{1.185}$$

$$p=3 \cdot \exp(-DE/k/T)/Q \cdot 100 = \mathbf{15.62} \%$$

### 2. Boltzmannova pravděpodobnost

Za jisté koncentrace ligandu G je obsazeno 5 % vazebných míst A a 10 % vazebných míst B. Jaký je rozdíl energií (přesněji Gibbsových energií) vazby ligandu na oba receptory? Teplota je

$T=300 = \mathbf{300} \text{ K}$ .

- Uvažujte Boltzmannovu pravděpodobnost
- Uvažujte rovnováhy  $G + A \rightarrow GA$  a  $G + B \rightarrow GB$ , vypočítejte podíl rovnovážných konstant těchto reakcí a z nich rozdíl Gibbsových energií.
- Proč se oba výsledky liší?

παεγδζηθικλμνξοπρστυφχψω – ηζθικλμνξοπρστυφχψω (α) (β) (γ) (δ) (ε) (ς) (ζ) (η) (θ) (ι) (κ) (λ) (μ) (ν) (ξ) (ο) (π) (ρ) (σ) (τ) (υ) (φ) (χ) (ψ) (ω) (α) (β) (γ) (δ) (ε) (ς) (ζ) (η) (θ) (ι) (κ) (λ) (μ) (ν) (ξ) (ο) (π) (ρ) (σ) (τ) (υ) (φ) (χ) (ψ) (ω)

$$-R \cdot T \cdot \ln(10/5) \text{ ! inverzí vztahu pro boltzmannův faktor} = \mathbf{-1729} \text{ J mol}^{-1}$$

$$K_{GA} = 0.05/0.95 \text{ ! } G + A \rightarrow GA = \mathbf{0.05263}$$

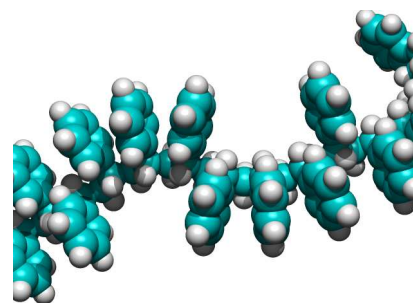
$$K_{GB} = 0.1/0.9 \text{ ! } G + B \rightarrow GB = \mathbf{0.1111}$$

$$DG = -R \cdot T \cdot \ln(K_{GB}/K_{GA}) = \mathbf{-1864} \text{ J mol}^{-1}$$

### 3. Entropie

Předpokládejte, že v budoucnu nám vývoj nanotechnologií umožní skladovat informaci pomocí konformací ataktického polystyrenu.

- Jaká hmotnost polystyrenu je ideálně potřeba k zápisu 1 PB (peta =  $1 \cdot 10^{15}$ )?
- Jaká je informační entropie (na jeden článek řetězce, v molárních jednotkách)?
- Jaká energie je minimálně potřeba k zápisu 1 PB za teploty 300 K? (Chemickou energii syntézy řetězce neuvažujte.)
- Jakou minimální energii bychom potřebovali, kdybychom informaci zapisovali pomocí kopolymeru polystyrenu (80 mol. %) a akrylonitrilu (20 mol. %)?



ηθικλμνξοπρστυφχψω – ηζθικλμνξοπρστυφχψω (α) (β) (γ) (δ) (ε) (ς) (ζ) (η) (θ) (ι) (κ) (λ) (μ) (ν) (ξ) (ο) (π) (ρ) (σ) (τ) (υ) (φ) (χ) (ψ) (ω) (α) (β) (γ) (δ) (ε) (ς) (ζ) (η) (θ) (ι) (κ) (λ) (μ) (ν) (ξ) (ο) (π) (ρ) (σ) (τ) (υ) (φ) (χ) (ψ) (ω)

$$N=8e15 \text{ ! počet bitů} = \mathbf{8e+15}$$

$$N \cdot M(C_2H_3C_6H_5)/N_A \text{ ! a) hmotnost } N \text{ článků} = \mathbf{1.384e-06} \text{ g}$$

$$S_b = R \cdot \ln 2 \text{ ! b) entropie/mol článků} = \mathbf{5.763} \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$W = N \cdot k \cdot \ln 2 \cdot 300 \text{ ! c) } \Delta G = W = \mathbf{2.297e-05} \text{ J}$$

$$W \text{ ! d) stejnou, protože informační entropie je stejná} = \mathbf{2.297e-05} \text{ J}$$