http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS 1. gāzveida **6$CO_2$** foto sintēze par **6$O_{2aqua}$** un **$C_6H_{12}O_6$**
http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/Aprekini.xls

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$**.** Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Foto sintētiskajā reakcijas centrā PRC+**h•v** gāzveida **$CO_2$** asimilācijas reakcija ūdenī zaļajos augos ar zilo un sarkano fotonu **E=h•v** enerģiju, foto sintezējot **6$O_{2aqua}$** un **$C_6H_{12}O_6$** standarta apstākļos (25°C) 298.15 K, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**! Izejvielas => produkti glikoze + skābeklis

| *Viela* | $\Delta H°_r$, kJ/mol | $\Delta S°_r$, J/mol/K |
|---|---|---|
| **$C_6H_{12}O_{6\ (aq)}$** | -1263.78 | 269.45 |
| **$O_{2aqua}$** | -11.715 | 110.876 |
| **$H_2O$** | -285.85 | 69.9565 |
| **$CO_2\uparrow_{gas}$** | -393.509 | 213.74 |

**6$CO_2\uparrow_{gas}$+6 $H_2O$+ΔG +Q—PRC+hv> $C_6H_{12}O_6$+ 6$O_{2aqua}$**
<=biooksidēšana (Krebsa cikls, Glikolīze)

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°izejvielas$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°izejvielas$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{C6H12O} + 6\Delta H°_{O2} - 6\Delta H°_{H2O} - 6\Delta H°_{CO2}$=..... kJ/mol....
.....=-1263.78-6*11.715-(6*-285.85+6*-393.509) =-1334.07+4076154= +2742.084 kJ/mol **endotermiska**....
2. $\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T = -2742.084 /298.15= -9196,9948 ..... J/mol/K....
$\Delta S_r = \Delta S°_{C6H12O} + 6\Delta S°_{O2} - 6\Delta S°_{H2O} - 6\Delta S°_{CO2}$=..... J/mol/K....
.....=269.45+6*110.876-(6*69.9565+6*213.74)=934.706-1702.179= -767.473 J/mol/K.....
3. $\Delta S_{kopēja}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$=-767.473 -9196,9948 = -9964,4678..... J/mol/K....
$\Delta G_r = \Delta H_r$- T*$\Delta S_r$= +2742,084-298,15*-0,76747= +3942.084+228.8221= +2970,906..... kJ/mol **endoerģiska**....
T•$\Delta S_{kopēja}$=-9964,4678 *298,15=**-2970,9**.....kJ/mol ....saistīta TΔSn← uzkrātā enerģija

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS 1a. gāzveida **6$CO_2$** foto sintēze par **$C_6H_{12}O_6$** un gāzveida **6$O_2\uparrow_{gas}$**
Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$**.** Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Foto sintētiskajā reakcijas centrā PRC+**h•v** gāzveida **$CO_2$** asimilācijas reakcija ūdenī zaļajos augos ar zilo un sarkano fotonu **E=h•v** enerģiju, foto sintezējot **6$O_2\uparrow_{gas}$** un **$C_6H_{12}O_6$** standarta apstākļos (25°C) 298.15 K, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**! Izejvielas => produkti glikoze + skābeklis

| *Viela* | $\Delta H°_r$, kJ/mol | $\Delta S°_r$, J/mol/K |
|---|---|---|
| **$O_2\uparrow_{gas}$** | 0 | 205,04 |

**6$CO_2\uparrow_{gas}$+6 $H_2O$+ΔG +Q—PRC+hv> $C_6H_{12}O_6$+ 6$O_2\uparrow_{gas}$**

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{C6H12O} + 6\Delta H°_{O2} - 6\Delta H°_{H2O} - 6\Delta H°_{CO2}$=..... kJ/mol
.....= -1263,78-6*0-(6*-285,85+6*-393,509)= -1263,78+4076,154= +2812,37 kJ/mol **endotermiska**....
2. $\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T = -2812,37 /298.15= -9432,59 ..... J/mol/K....
$\Delta S_r = \Delta S°_{C6H12O} + 6\Delta S°_{O2} - 6\Delta S°_{H2O} - 6\Delta S°_{CO2}$=..... J/mol/K....
..... =269,45+6*205,04-(6*69,9565+6*213,74)= 1499,69-1702.179= -202,489 J/mol/K.....
3. $\Delta S_{kopēja}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$=-202,489-9432,59 = -9635,079..... J/mol/K....
$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = +2812,37-298,15*-0,202489 =2812,37+60,3721= +2872,74.....kJ/mol **endoerģiska**....
T•$\Delta S_{kopēja}$=-9635,079*298,15= **-2872,7**.....kJ/mol saistīta TΔSn← uzkrātā enerģija

**$C_6H_{12}O_6$+ 6$O_2\uparrow_{gas}$ —BioOxv> 6$CO_2\uparrow_{gas}$+6 $H_2O$+ΔG +Q**

1. $\Delta H_r = 6\Delta H°_{H2O} + 6\Delta H°_{CO2} - \Delta H°_{C6H12O} - 6\Delta H°_{O2}$ =..... kJ/mol....
.....= 6*-285,85+6*-393,509-(-1263,78-6*0)= -4076,154+1263,78= -2812,37 kJ/mol **eksotermiska**.....
2. $\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T = --2812,37 /298.15= +9432,59 ..... J/mol/K....
$\Delta S_r = 6\Delta S°_{H2O} + 6\Delta S°_{CO2} - \Delta S°_{C6H12O} - 6\Delta S°_{O2}$ =..... J/mol/K....
..... =6*69,9565+6*213,74-(269,45+6*205,04)= 1702.179-1499,69= +202,489 J/mol/K.....
3. $\Delta S_{kopēja}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$=202,489+9432,59 = 9635,079..... J/mol/K....
$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$= -2812,37-298,15*0,202489= -2812,37-60,3721= -2872,74..... kJ/mol **eksoerģiska**....
T•$\Delta S_{kopēja}$=9635,079*298,15= **+2872,7**..... kJ/mol saistīta TΔSn← izkliedētā enerģija

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

$$6C_{gr} + 6O_2\uparrow_{gas} \xrightarrow{Power\ Staition} 6CO_2\uparrow_{gas} + \Delta G + Q$$

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$C_{gr}$** | 0 | 5.74 |

1. $\Delta H_r = 6\Delta H°_{CO2} - 6\Delta H°_{Cgr} + 6\Delta H°_{O2}$ =..... **eksotermiska** $^{kJ}/_{mol}$
= 6*-393,509-(6*0-6*0) =-2361,05-0= -2361,05..... $^{kJ}/_{mol}$
2. $\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T$ = --2361,05 /298,15= 7919 ..... $^{J}/_{K/mol}$
$\Delta S_r = 6\Delta S°_{CO2} - 6\Delta S°_{Cgr} - 6\Delta S°_{O2}$ =6*213,74-(6*5,74+6*205,04)=1282,44-1264,68= 17,76 $^{J}/_{mol/K}$.....
3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$=17,76+7919 = 7936,76..... $^{J}/_{mol/K}$
$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = -2361,05-298,15*0,01776 = +2361,05-5,295 = -2366,35..... $^{kJ}/_{mol}$ **eksoerģiska**....
$T•\Delta S_{kopēja}$=7936,76 *298,15=**+2366,35**..... $^{kJ}/_{mol}$ saistīta TΔSn← izkliedētā enerģija

$$32H_{liquid} + 15C_{gr} + 23O_2\uparrow_{gas} \xrightarrow{Power\ Staition} 15CO_2\uparrow_{gas} + 16H_2O + \Delta G + Q$$

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$H_{atomic}$** | 218.0 | 114.7 |

1.$\Delta H_r = 15\Delta H°_{CO2} + 16\Delta H°_{H2O} - 32\Delta H°_{H} - 15\Delta H°_{Cgr} - 23\Delta H°_{O2}$=-17452,2
=15*-393,509+16*-285,85-(32*218+15*0+23*0)=-10476-6976=.. $^{kJ}/_{mol}$
2. $\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T$ = --17452,2 /298,15= 58535 ..... $^{J}/_{K/mol}$
2. $\Delta S_r = 15\Delta S°_{CO2} + 16\Delta S°_{H2O} - 32\Delta S°_{H} - 15\Delta S°_{Cgr} - 23\Delta S°_{O2}$= $^{J}/_{mol/K}$.....
.....=15*213,74+16*69,9565-(32*114,7+15*5,74+23*205,04) =4325,4-8472.42= -4147 $^{J}/_{mol/K}$.....
3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$=58535-4147 = 54388..... $^{J}/_{mol/K}$
$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$=-17452,2-298,15*-4,147= -17452,2+1236,43= -16215,8..... $^{kJ}/_{mol}$ **eksoerģiska**....
$T•\Delta S_{kopēja}$=54388 *298,15=**+16215,8**..... $^{kJ}/_{mol}$ saistīta TΔSn← izkliedētā enerģija

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Beta oksidēšana mitohondrijā, peroksi somā palmitīnskābei ar $O_{2aqua}$ standarta apstākļos (25° C) 298.15 K, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

Izejvielas => produkti bikarbonāts +hidronija jons

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$C_{16}H_{32}O_{2s}$** | -891.5 | 452.4 |
| **$C_{16}H_{32}O_{2liquid}$** | -838.1 | - |
| **$O_{2aqua}$** | -11.715 | 110.876 |
| **$H_2O$** | -285.85 | 69.9565 |
| **$H_3O^+$** | -285,81 | -3,854 |
| **$HCO_3^-$** | -689,93 | 98,324 |

$$C_{16}H_{32}O_{2s} + 16H_2O + 23O_{2aqua} \xrightarrow{beta\ oxidation} 16HCO_3^- | + 16H_3O^+ + \Delta G + Q$$

biooksidēšana (mitohondrijā un peroksisomā)

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°izejvielas$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°izejvielas$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T•\Delta S_{reakcija}$

1.$\Delta H_r = 16\Delta H°_{HCO3} + 16\Delta H°_{H3O} - \Delta H°_{C6H12O} - 16\Delta H°_{H2O} - 23\Delta H°_{O2}$=.... $^{kJ}/_{mol}$
2.$\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T$ = --9853,87/298,15= 33050 ..... $^{J}/_{mol/K}$.
=16*-689,93+16*-285,81-(16*-285.85+23*-11.715+-891.5)=-15611,8+5757,98= -9853,87 $^{kJ}/_{mol}$ eksotermiska.....
2.$\Delta S_r = 16\Delta S°_{HCO3} + 16\Delta S°_{H3O} - \Delta S°_{C6H12O} - 16\Delta S°_{H2O} - 23\Delta S°_{O2}$=..... $^{J}/_{mol/K}$....
=16*98,324+16*-3,854-(16*69,9565+23*110,876+452,4)=1511,52-4121,85= -2610,33 $^{J}/_{mol/K}$.....
3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$=33050-2610,33= 30439,7..... $^{J}/_{mol/K}$....
3.$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$=-9853,87-298,15*-2,61033=-9853,87+778,27= -9075,6..... $^{kJ}/_{mol}$ **eksoerģiska**....
$T•\Delta S_{kopēja}$=30439,7*298,15=**9075,6**..... $^{kJ}/_{mol}$....saistīta TΔSn← izkliedētā enerģija

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$C_{16}H_{32Liq}$** | -328.7 | 587.9 |
| **$O_2\uparrow_{gas}$** | 0 | 205,04 |
| **$H_2O$** | -285.85 | 69.9565 |
| **$CO_2\uparrow_{gas}$** | -393.509 | 213.74 |

heksadekēns $C_{16}H_{32liq} + 24O_2\uparrow_{gas} \xrightarrow{degšana} 16CO_2\uparrow_{gas} + 16H_2O + \Delta G + Q$

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°izejvielas$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°izejvielas$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T•\Delta S_{reakcija}$

1.$\Delta H_r = 16\Delta H°_{CO2} + 16\Delta H°_{H2O} - \Delta H°_{C16H32} - 24\Delta H°_{O2}$=..... $^{kJ}/_{mol}$
=16*-393,509+16*-285,85-(24*0-328,7) =-10869,7+328,7=-10541 $^{kJ}/_{mol}$ eksotermiska.....
2.$\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T$= --10541/298,15= 33050 ..... $^{J}/_{mol/K}$.
2.$\Delta S_r = 16\Delta S°_{CO2} + 16\Delta S°_{H2O} - \Delta S°_{C16H32} - 24\Delta S°_{O2}$=..... $^{J}/_{mol/K}$....
=16*213,74+16*69,9565-(24*205,04+587,9) =4539,14-5508,86=-969,716 $^{J}/_{mol/K}$.....
3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$=33050-969,716= 32080,7..... $^{J}/_{mol/K}$....
3.$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$=-10541-298,15*-0,969716=-10541+289,121= -10251,9..... $^{kJ}/_{mol}$ **eksoerģiska**....
$T•\Delta S_{kopēja}$=34385*298,15=**10251,9**..... $^{kJ}/_{mol}$....saistīta TΔSn← izkliedētā enerģija

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS II. GAISA **$CO_2$** izšķīšanas reakcija ūdenī **$CO_{2aqu}$**

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$**.** Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? No GAISA ūdenī **$CO_2$** izšķīšanas reakcija zaļajos augos +atvārsnīšu iekļautā šūnu membrānu virsmā standarta apstākļos 298.15 K lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$CO_{2aqua}$** | -413,7076 | 117,57 |
| **$H_2O$** | -285,85 | 69,9565 |
| **$CO_2\uparrow_{gas}$** | -393,509 | 213,74 |

Izejvielas => produkti

**$CO_2\uparrow_{gas}+H_2O+\Delta G \xrightarrow{atvārsnītes\_Šūnu\_Membrānas} H_2O+CO_{2aqua}+Q$**

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T\bullet\Delta S_{reakcija}$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{CO2aqua} - \Delta H°_{H2O} - \Delta H°_{CO2gas}$=.....kJ/mol....
.....=-413,7076-285,85-(-393,509+-285,85) =-413,7076-(-393,509) = -20,1986 $^{kJ}/_{mol}$ **eksotermiska**....
.....
.....
.....
$\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T =20,1986/298.15= 67,746436 .....J/K/mol....
.....
.....
.....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H2O} + \Delta S°_{CO2aqua} - \Delta S°_{H2O} - \Delta S°_{CO2gas}$=..... $^{J}/_{mol/K}$....
.....=117,57+69,9565-(213,74+69,9565)= 117,57-(-213,74)= -96,17..... $^{J}/_{mol/K}$....
.....
.....
.....
$\Delta S_{kopēja}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$=-96,17 +67,746436 = -28,424 .....J/K/mol....
.....
.....
.....
3.$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = -20,1986-298.15*-96,17= -20,1986+28.673 = +8,474.....**endoerģiska**.....
.....kJ/mol....
.....
.....
.....
T•$\Delta S_{kopēja}$=-28,424*298,15K=**--8,47**.....kJ/mol ....
saistīta TΔSn← uzkrātā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ ←... Q= -3942.084 kJ/mol .....**nav patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ = +8,474kJ/mol.....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS III. Bikarbonāta **$6HCO_3^-$+$6H_3O^+$** foto sintēze **$6O_2$** un **$C_6H_{12}O_6$**

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Bikarbonāta asimilācijas ūdenī zaļajos augos ar zilo un sarkano fotonu **E=h•v** enerģijas absorbciju foto sintētiskajā reakcijas centrā PRC+**h•v** producē **$6O_{2aqua}$** un **$C_6H_{12}O_6$** standarta apstākļos 298.15 K. Lietojiet tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

Izejvielas ⇔ produkti glikoze + skābeklis+ ūdens

**$6HCO_3^-$+$6H_3O^+$+ΔG+Q** $\xrightarrow{PRC+hv}$ **$C_6H_{12}O_6$+$6O_{2aqua}$+$6H_2O$**

<biooksidēšana (Krebsa cikls, Glikolīze)

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T\bullet\Delta S_{reakcija}$

| *Viela* | $\Delta H°_r$, kJ/mol | $\Delta S°_r$, J/mol/K |
|---|---|---|
| **$C_6H_{12}O_6$** *(aq)* | -1263,78 | 269,45 |
| ***$O_{2aqua}$*** | -11,715 | 110,876 |
| **$H_2O$** | -285,85 | 69,9565 |
| **$H_3O^+$** | -285,81 | -3,854 |
| **$HCO_3^-$** | -689,93 | 98,324 |

1.$\Delta H_r = \Delta H°_{C6H12O6} + 6\Delta H°_{O2} + 6\Delta H°_{H2O} - 6\Delta H°_{H3O} - 6\Delta H°_{HCO3} = +2805,27$..... kJ/mol

. =-1263,78+6*-11,715+6*-285,85-(6*-689,93+6*-285,81)=-3049,17+5854,44 = +2805,27 kJ/mol **endotermiska**.....

2. $\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r/T = -2805,27*1000/298.15 = -9408,9$..... J/mol/K

$\Delta S_r = \Delta S°_{C6H12O6} + 6\Delta S°_{O2} + 6\Delta S°_{H2O} - 6\Delta S°_{H3O} + 6\Delta S°_{HCO3} =$..... J/mol/K....

..... =269,45+6*110,876+6*69,9565-(6*98,324+6*-3,854)=1354,45-566,82=.787,625 J/mol/K.....

$\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta} = 787,625-9408,9217 = -8621,3$..... J/mol/K....

3. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r = 2805,27-298,15*0,787625 = 2805,27-234,83 = 2570,4$ **endoerģiska**..... kJ/mol

$T\bullet\Delta S_{kopēja}$= -8621,3 J/K/mol•298,15K= **-2570,4**..... kJ/mol ....

saistīta TΔSn← uzkrātā enerģi $\Delta G_{pretreakcija}$←....Q= -2805,27 kJ/mol.....**nav patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ = 2057,4 kJ/mol.....

lpp.3:http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/BioChemicalPproces.pdf.

Uzkrātā enerģija $T\Delta S_{kopēja}$= **-3040,1** kJ/mol ir saistīta produktos: **$C_6H_{12}O_6$+$6O_{2aqua}$+$6H_2O$**.....

Biodegviela **$C_6H_{12}O_6$+$6H_2O$+$6O_{2aqua}$**!

Izejvielas ⇔ produkti

**$C_6H_{12}O_6$+$6O_{2aqua}$+$6H_2O$** $\xrightarrow{biooksidēšana}$ **$6HCO_3^-$+$6H_3O^+$+ΔG+Q**

| *Viela* | $\Delta H°_r$, kJ/mol | $\Delta S°_r$, J/mol/K |
|---|---|---|
| **$C_6H_{12}O_6$** *(aq)* | -1263,78 | 269,45 |
| ***$O_{2aqua}$*** | -11,715 | 110,876 |
| **$H_2O$** | -285,85 | 69,9565 |
| **$H_3O^+$** | -285,81 | -3,854 |
| **$HCO_3^-$** | -689,93 | 98,324 |

1.$\Delta H_r = 6\Delta H°_{H3O} + 6\Delta H°_{HCO3} - \Delta H°_{C6H12O6} - 6\Delta H°_{O2} - 6\Delta H°_{H2O} - = -2805,27$..... kJ/mol

=6*-689,93+6*-285,81-(-1263,78-6*11,715-6*285,85)=.....

= -5854,44+3049,17= -2805,27 kJ/mol **eksotermiska**.....

2.$\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r/T = 9408,9217$..... J/mol/K

=--2805,27 *1000/298.15=9408,9217..... J/mol/K

$\Delta S_r = 6\Delta S°_{H3O} + 6\Delta S°_{HCO3} - \Delta S°_{C6H12O6} - 6\Delta S°_{O2} - 6\Delta S°_{H2O} =$..... J/mol/K....

... = 6*98,324+6*-3,854-(269,45+6*110,876+6*69,9565)= 566,82-1354,445= -787,625..... J/mol/K

$\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta} = -787,625+9408,9217 = +8621,3$..... J/mol/K....

3. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r = -2805,27-298,15*-0,787625 = -2805,27+234,83 = -2570,4$ **eksoerģiska**..... kJ/mol

$T\bullet\Delta S_{kopēja}$= 8621,3 J/K/mol•298,15K= **2570,4**..... kJ/mol....

saistīta TΔSn← uzkrātā enerģi $\Delta G_{pretreakcija}$←....Q= 2805,27 kJ/mol.....**patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ = -2570,4 kJ/mol.....

lpp.3: http://aris.gusc.lv/NutritionBioChem/35Ogl45Hidr150211.pdf. Biodegvielas **$C_6H_{12}O_6$+$6O_{2aqua}$+$6H_2O$** izkliedētā brīvā enerģija $T\Delta S_{kopēja}$= **+3040,1** kJ/mol iztērēta ģenerētajās **$6HCO_3^-$+$6H_3O^+$** produktu koncentrācijās.

Ūdens gāze **$6CO\uparrow_{gas}$** + **$6H_{2gas}$** ir ēku apkures un ielu apgaismošanas degviela lietota 19.,20. gadsimta sākumā Rīgā

**$6\ CO\uparrow_{gas} + 6\ H_{2gas} + 6\ O_2\uparrow_{gas}$** —$\xrightarrow{ūdens\text{-}gas}$> **$6CO_2\uparrow_{gas}$** + 6 **$H_2O\uparrow_{gas}$** +ΔG +Q **eksotermiska**.....

| *Viela* | $\Delta H°_r$, kJ/mol | $\Delta S°_r$, J/mol/K |
|---|---|---|
| ***$CO\uparrow_{gas}$*** | -110,525 | 197,674 |
| **$H_{2gas}$** | 0 | 130,68 |
| ***$O_2\uparrow_{gas}$*** | 0 | 205,04 |
| ***$H_2O\uparrow_{gas}$*** | -241,8352 | 188,74024 |

1.$\Delta H_r = 6\Delta H°_{CO2} + 6\Delta H°_{H2O} - 6\Delta H°_{H2gas} - 6\Delta H°_{COgas} - 6\Delta H°_{O2gas} =$..... kJ/mol

=6*-393,509+6*-241,8352-(6*-110,53+6*0+6*0)=..... kJ/mol

=-3812,07+663,18= -3148,89 **eksotermiska**..... kJ/mol

2.$\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r/T = --3148,89/298,15 = 10561,4$..... J/K/mol

2.$\Delta S_r = 6\Delta S°_{CO2} + 6\Delta S°_{H2O} - 6\Delta S°_{H2gas} - 6\Delta S°_{COgas} - 6\Delta S°_{O2gas} =$..... J/K/mol

.....=6*213,74+6*188,74024-(6*130,68+6*197,66+6*205,04)=2414,88-3200,28= -785,399 J/mol/K.....

3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta} = -785,399+10561,4 = 9776$..... J/mol/K

$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r = -3148,89-298,15*-0,785399 = -3148,89+234,16 = -2914,72$..... kJ/mol **eksoerģiska**....

$T\bullet\Delta S_{kopēja}$=9776*298,15=**+2914,7**..... kJ/mol saistīta TΔSn← izkliedētā enerģija

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS IV. vitamīnam $B_3$ etanālu $H_3CCH{=}O$ reducējot $H_3CCH_2OH$ etanols

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Reakcija standarta apstākļos 298.15 K. Vitamīna B3 aneiroba etanāla reducēšana par etanolu alkohola dehidrogenāzes fermentācijā! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$H_3C$-CH=$O_{aq}$** | -212,23 | -281,84 |
| NAD**H**$_{(aq)}$ | -1036,66 | -140,50 |
| **$H_3O^+_{(aq)}$** | -285.81 | -3,854 |
| **$H_3C$-$CH_2$-OH$_{aq}$** | -288,3 | -357,74 |
| $NAD^+_{(aq)}$ | -1007,48 | -183 |
| **$H_2O_{(aq)}$** | -285.85 | 69,96 |

Izejvielas => produkti+ΔG+**Q**

**$H_3C$-CH=O**+NAD**H**+**$H_3O^+$**=>**$H_3C$-$CH_2$-OH**+$NAD^+$+**$H_2O$**

<=aeroba alkohola dehidrogenāzes B3 vitamīna fermentācija

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{CH3CH2OH} + \Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{NAD+} - \Delta H°_{H3O} - \Delta H°_{CH3CHO} - \Delta H°_{NADH}$ =.....kJ/mol....
.....= -288,3-1007,48-285,85-(-212,23-1036,66-285,81)= -1581,63+1534,7= -46,93- $^{kJ}/_{mol}$ **eksotermiska**....
.....
.....
.....
.....
.....

2. $\Delta S_{izkliedēta} = - \Delta H_r / T = - -46{,}93/298.15 = +157.4$.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....

$\Delta S_r = \Delta S°_{CH3CH2OH} + \Delta S°_{H2O} + \Delta S°_{NAD+} - \Delta S°_{H3O} - \Delta S°_{CH3CHO} - \Delta S°_{NADH}$ =.....kJ/mol....
.....= -357,7394-183+69,956-(-281,838-140,50-3,854)= -470,78+426,192= -44,588 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....
.....
.....
.....
.....

3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$= 157.4 -44,588= +112.812.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....

$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = -46,93-298,15*(-44,588)/1000= -33,636 .....kJ/mol....
.....**eksoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....

$T \bullet \Delta S_{kopēja}$= +112.812 3 $^{J}/K/_{mol} \bullet$298,15 K= **+33.635**.....kJ/mol....
saistīta TΔSn← zaudēta enerģi $\Delta G_{pretreakcija}$ ←...Q= +46,93kJ/mol **patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ = -33,636 kJ/mol

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS V sāls **$Na^+Cl^-$** kristāliem hidratācijas reakcijā ar ūdeni

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Reakcija standarta apstākļos 298.15 K sāls **$Na^+Cl^-$** kristāliem hidratācijas reakcijā ar ūdeni lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| kristālisks **$Na^+Cl^-$** | -411.12 | 72.00 |
| **$Na^+_{aqua}$** | -240.10 | 59.00 |
| **$Cl^-_{aqua}$** | -167.2 | 56.50 |

Izejvielas => produkti

kristālisks **$Na^+Cl^-$** + $12\mathbf{H_2O}_{brīvo}$+**Q** =>**$Na^+_{aqua}$**+$6\mathbf{H_2O}$+**$Cl^-_{aqua}$**+ $6\mathbf{H_2O}$+$\Delta G$

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$

2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$

3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{Na^+} + \Delta H°_{Cl^-} - \Delta H°_{Na^+Cl^-}$ =.....kJ/mol....
.....= -240.1-167.2-(-411.12) =-407.3+411.12= +3.82 $^{kJ}/_{mol}$ **endotermiska**.....
.....
.....
.....
.....
.....

2. $\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T$ = -3.82 /298.15= -12.812 .....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....

$\Delta S_r = \Delta S°_{Na^+} + \Delta S°_{Cl^-} - \Delta S°_{Na^+Cl^-}$= 59.00+56.50-(72.00)= 115.5-72.00= +43.5.....$^{J}/_{mol/K}$....
.....
.....
.....
.....
.....

3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$= -12.812+43.5= +30.688.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....

$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = +3.82 -298.15*0.0435 = -9.15 .....kJ/mol....
.....**eksoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....

$T \bullet \Delta S_{kopēja}$=+30.688 $^{J}/_{K/mol} \bullet$298,15 K=+**9.15** .....kJ/mol....
saistīta $T\Delta Sn \leftarrow$ zaudēta brīvā enerģija $\Delta G_{pretreakcija} \leftarrow$..Q= -3.82 kJ/mol.....**patvaļīga** $\Delta G_r$=-9.15 kJ/mol.....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS VI Enzīms CA skābes/bāzes līdzsvars $\mathbf{H_2O^{/CA/}CO_2/H_3O^+ + HCO_3^-}$

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos (298.15 K). Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Enzīma karboanhidrāzes (CA) skābes/bāzes līdzsvars $\mathbf{H_2O^{/CA/}CO_2/H_3O^+ + HCO_3^-}$ virza $\mathbf{CO_{2aqua}}$ reakciju ar ūdens molekulām $2\mathbf{H_2O}$ lietojot tabulas datus! Miniet vai būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| $\mathbf{H_3O^+}$ | -285.81 | -3.854 |
| $\mathbf{HCO_3^-}$ | -689.93 | 98.324 |
| $\mathbf{H_2O}$ | -285.85 | 69.9565 |
| $\mathbf{CO_{2aqua}}$ | -413.7976 | 117.5704 |

Izejvielas => produkti

$\mathbf{CO_{2aqua} + 2H_2O + \Delta G + Q} \xrightarrow{CA} \mathbf{H_3O^+ + HCO_3^-}$.....

1. $\Delta H_{reakcija} = \Delta H°_{produkti} - \Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Delta S°_{produkti} - - \Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{\mathbf{H3O}} + \Delta H°_{\mathbf{HCO3}} - 2\Delta H°_{\mathbf{H2O}} - \Delta H°_{\mathbf{CO2}}$ =.....

....=-285.81-689.93-(2*-285.85-413.7976) =-975.74+985.3276= +9.7576 **endotermiska**.....

.....$^{kJ}/_{mol}$....

.....

.....

.....

.....

.....

$\Delta S_{izkliedēta} = - \Delta H_r / T$ = -9.7576 /298.15= -32.727 .....J/K/mol....

.....

.....

.....

.....

.....

2. $\Delta S_r = \Delta S°_{\mathbf{H3O}} + \Delta S°_{\mathbf{HCO3}} - 2\ \Delta S°_{\mathbf{H2O}} - \Delta S°_{\mathbf{CO2}}$=.....$^{J}/_{mol/K}$....

.....=-3.854+98.324-(2*69.9565+117.5704)= 94.47-257.482= -163.0134 $^{J}/_{mol/K}$.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

$\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$= -32.727 -163.0134 = -195.169.....J/K/mol....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

3. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = +9.7576 +298.15*0.1630134= +58.19.....kJ/mol....

.....**endoerģiska**.....

.....

.....

.....

.....

.....

$T \bullet \Delta S_{kopēja}$=-195.7404*298,15 K=**-58.19**.....kJ/mol....

saistīta TΔSn← uzkrāj brīvo enerģiju $\Delta G_{pretreakcija}$ ←.Q=-9.7576 kJ/mol **endoerģiska** $\Delta G_{reakcija}$=+58.19kJ/mol....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS VII $H_2O$+$CO_2$lietojot jonu kanālus $H_3O^+$+$HCO_3^-$ virza uz $CO_{2gas}$

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos (298.15 K). Skābes/bāzes līdzsvars $H_2O$+$CO_2$, lietojot jonu kanālus $H^+$+$HCO_3^-$ virza plaušās reakcijas produktus uz izelpu $CO_{2gas}$ ar ūdens molekulām $2H_2O$ (**eksotermiski**, **atermiski** vai **endotermiski**?). Lietojiet tabulas datus! Minēt reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, kJ/mol | $\Delta S°_r$, J/mol/K |
|---|---|---|
| $H_3O^+$ | -285.81 | -3.854 |
| $HCO_3^-$ | -689.93 | 98.324 |
| $H_2O$ | -285.85 | 69.9565 |
| $CO_2\uparrow_{gas}$ | -393,509 | 213,74 |

Izejvielas => produkti

$H_3O^+$+$HCO_3^-$+Q =kanāli$H^+$; $HCO_3^-$=>$CO_{2gas}$+2$H_2O$+$\Delta G$.....

<=asimilējas fotosintēzes vajadzībām augu atvārsnītēs

1. $\Delta H_{reakcija}$= $\Delta H°_{produkti}$- $\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija}$= $\Delta S°_{produkti}$- - $\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija}$=$\Delta H_{reakcija}$-T•$\Delta S_{reakcija}$

1. $\Delta H_r$=2$\Delta H°_{H2O}$+ $\Delta H°_{CO2}$ -$\Delta H°_{H3O}$-$\Delta H°_{HCO3}$ =.....kJ/mol....
.....=2*-285,85-393,509-(-285,81-689,93)=-965,209+975,74= +10,531 kJ/mol **endotermiska**....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T =-10,531/298,15= -35,3211….....J/K/mol....
.....kJ/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
2. $\Delta S_r$=2$\Delta S°_{H2O}$+ $\Delta S°_{CO2}$ -$\Delta S°_{H3O}$-$\Delta S°_{HCO3}$ =.....J/mol/K....
.....=2*69,9565+213,74-(-3,854+98,324)= 353,653-94.47= 259,183.....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{kopējā}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$=259,183-35,3211= +223,8619.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
3. $\Delta G_r$ = $\Delta H_r$ – T*$\Delta S_r$ =10,531-298,15*0,259183 = -66,744411.....kJ/mol....
.....**eksoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....
T•$\Delta S_{kopēja}$=223,8619*298,15 K= **+66.7444**.....kJ/mol....
saistīta TΔSn← zaudēta brīvā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ Q=-10,531 kJ/mol **eksoerģiska patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ =-66,7444 kJ/mol....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS VIII. glicīns + glicīns=>glicilglicīns dipeptīda sintēze

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos (298.15 K). Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Peptīda sintēze poli kondensācijas Enzīma ribosomas virzīta reakcija ar amino skābi glicīnu Gly (G) lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

..... J.Phys.Chem.Ref.Data, Vol. 19, No. 4, 1990; Chem. Phys. CRC, 2010-2005, p.876,882,1220,1223

glicīns + glicīns→glicilglicīns dipeptīda sintēze

**$Gly_{aqua}$ + $Gly_{aqua}$ +Q +ΔG →$^{Ribosoma}$→ Gly-$Gly_{aqua}$+ $H_2O$**.....

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$Gly_{aqua}$** | −554.56 | 76.45 |
| **Gly-$Gly_{aqua}$** | -790.99 | -1 |
| **$H_2O$** | -285.83 | 69.9565 |
| I=0 M | **I=0,1 M** | I=0.2 M |
| -180.13 | **-177.07.** | -176.08 |
| -200.55 | **-195.65** | -194.07 |
| -213.275 | -213.275 | 213.275 |

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

$\Delta G°_{rašanās}$ kJ/mol $\Delta G°_{H2O}$ = -237.19 $^{kJ}/_{mol}$

**$Gly_{aqua}$** $\Delta G_r = \Sigma\Delta G°_{produkti} - \Sigma\Delta G°_{izejvielas}$

**Gly-$Gly_{aqua}$** ; $\Delta G_r$=-200,5-213,275-(2*-180,13)= -53.515 $^{kJ}/_{mol}$ **endoerģiska**

**$H_2O$**

$\Delta G_r$=-195.65-213,275-(2*-177.07)= -54,785 $^{kJ}/_{mol}$ **endoerģiska**.....

$\Delta G_r$= -194,07-213,275 (2*-176,08)= -55,185 $^{kJ}/_{mol}$ **endoerģiska**.....

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{Gly-Gly} + \Delta H°_{H2O} - 2\ \Delta H°_{Gly}$=-790.99-285.83-(2*-554.56)=-1076.82+1109.12=+32.3 $^{kJ}/_{mol}$ **endotermiska**.....
..... $^{.kJ}/_{mol}$

2. $\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T =-32.3/298.15= -108.335..... $^{.J}/_{mol/K}$

.....

$\Delta S_r = \Delta S°_{Gly-Gly} + \Delta S°_{H2O} - 2\ \Delta S°_{Gly}$ =..... $^{J}/_{mol/K}$

.....=-1+69.9565-(2*76.45)=68.957-152,9= - 83,944 $^{J}/_{mol/K}$.....

.....

3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$=-108.335-83.944= -192,279..... $^{J}/_{mol/K}$

Lapa 3: http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/08ThGlyGlyH2OCRC10LatSol.pdf

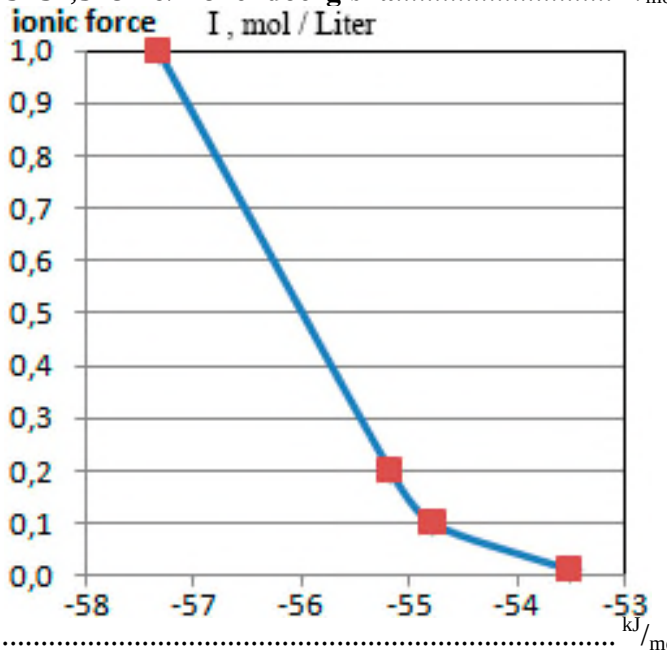
$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ =32.3-298.15*-0.083944=32,3+25,0279=57,328 kJ/mol **endoerģiska**..... $^{kJ}/_{mol}$

jonu spēks ir kopējā jonu summas koncentrācija
I = 1 $^{mol}/_{L}$ (1 M)

standarta entalpijas $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$
un
standarta entropijas $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$

mērījumā aprēķināts
$\Delta G_r$ = 57 $^{kJ}/_{mol}$

Chem. Phys. CRC, 2010-2005,
p.876,882,1220,1223




$T \bullet \Delta S_{kopēja}$ =-192,279 $^{J}/_{K}/_{mol}$•298,15 K= **-57,328**..... $^{kJ}/_{mol}$

saistīta $T\Delta Sn$←zaudētā brīvā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$..Q= -32.3 ..... $^{kJ}/_{mol}$ **endoerģiska**.ne**patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ =57,328l..... $^{kJ}/_{mol}$

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS IX No ūdens bikarbonāta šķīduma $CO_2$ iztvaikošanas reakcijā

*Uzdevums 6* (**11 punkts**) Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos 298.15 K. Vai reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Koncentrācijas gradientu virzienā[$H_3O$]$_{pa\_labi}$/[$H_3O$]$_{pa\_kreisi}$, [$HCO_3$]$_{palabi}$/[$HCO_3$]$_{pa\_kreisi}$ paralēli cauri protonu $H^+$, bikarbonāta $HCO_3^-$ kanāliem plaušās izelpojot $CO_2$ , $H_2O$. Lieto tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| $H_3O^+$ | -285,81 | -3,854 |
| $HCO_3^-$ | -689,93 | 98,324 |
| $H_2O$ | -285,85 | 69,9565 |
| $H_2O\uparrow_{gas}$ | -241,8352 | 188,7402 |
| $CO_2\uparrow_{gas}$ | -393,509 | 213,74 |

Izejvielas => produkti

$H_3O^+ + HCO_3^- + Q = \underline{\text{kanāli } H^+;\ HCO_3^-} => H_2O + H_2O\uparrow_{gas} + CO_2\uparrow_{gas} + \Delta G.$

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

$H^+$ kanāli: $\Delta G_H = RTln([H_3O]_{pa\_labi}/[H_3O]_{pa\_kreisi})$

$HCO_3^-$ kanāli: $\Delta G_{HCO3} = RTln([HCO_3]_{pa\_labi}/[HCO_3]_{pa\_kreisi})$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{H2O\uparrow gas} + \Delta H°_{CO2} - \Delta H°_{H3O} - \Delta H°_{HCO3}$= .....$^{kJ}/_{mol}$....
...= -285,85-241,8352-393,509-(-285,81-689,93) =-921.19+975.74= +54.546 $^{kJ}/_{mol}$**endotermiska**.....
.....
.....
.....
.....
2. $\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T = -54,546/298,15= -182,9475.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_r$==$\Delta S°_{H2O}$+ $\Delta S°_{H2O\uparrow gas}$ + $\Delta S°_{CO2}$-$\Delta S°_{H3O}$-$\Delta S°_{HCO3}$=.....J/K/mol....
.....= 69,956+188,74+213,74-(-3,854+98,324)= 353,652-94.47= +377,966 $^{J}/_{mol/K}$.....
$\Delta S_H$=**-Rln**(10-5,5/0,02754)=75,42909 $^{J}/_{mol/K}$.....$\Delta S_{HCO3}$=**-Rln**(0,0154/0,0338919)=6,55847 $^{J}/_{mol/K}$.....
$\Delta S_{rH}$=377,966+75,42909+6,55847 = 459,954 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....
.....
.....
.....
3. $\Delta S_{kopēja}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$= -182,95+377,966 =195,016 J/K/mol.....
$\Delta S_{Hkopēja}$= $\Delta S_{rH}$+ $\Delta S_{izkliedēta}$= -182,95+459,954=277,004 J/K/mol.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = +54,546-298,15*0, 377966 = -58,144 $^{kJ}/_{mol}$.....
$\Delta G_H$=**RTln**([$H_3O$]$_{pa\_labi}$/[$H_3O$]$_{pa\_kreisi}$)=-22,48918 $^{kJ}/_{mol}$.....$\Delta G_{HCO3}$=**RTln**([$HCO_3$]$_{pa\_labi}$/[$HCO_3$]$_{pa\_kreisi}$)=-1,9554$^{kJ}/_{mol}$.....
$\Delta G_{rH} = \Delta H_r - T*\Delta S_{rH}$ = +54,546-298,15*0,459954 = -82,589.....$^{kJ}/_{mol}$....
.....**eksoerģiska**.....
.....
.....
.....
T•$\Delta S_{kopēja}$=195,016 $^{J}/_{K/mol}$•298,15 K=**+58,144**.....kJ/mol....
T•$\Delta S_{Hkopēja}$=277,004 $^{J}/_{K/mol}$•298,15 K=**+82,589**=-58,144-22,48918-1,9554 $^{kJ}/_{mol}$.....
saistīta TΔSn← zaudēta brīvā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$.Q= -54,546 kJ/mol.....**patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ =-58,14 kJ/mol...
saistīta TΔSn← zaudēta brīvā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$.Q= -54,546 kJ/mol.....**patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ =-82,589 kJ/mol...

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS X. **$HCO_3^-$+$H_3O^+$** uz alveolu epitēlija šūnu virsmas veido **$H_2CO_3$**

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos 298.15 K. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Bikarbonāta un protona pārnese cauri membrānas kanāliem no šūnām ***plaušās*** uz epitēlija šūnu virsmas veidojot **$H_2CO_3$** .Lieto tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**! Izejvielas => produkti

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$H_3O^+$** | -285.81 | -3.854 |
| **$HCO_3^-$** | -689.93 | 98.324 |
| **$H_2O$** | -285.85 | 69.9565 |
| **$H_2CO_3$** | -699,65 | 187.00 |

**$H_3O^+$ + $HCO_3^-$** $\xrightarrow{\text{Membrānu}}$ **$H_2O$ + $H_2CO_3$** +ΔG+**Q**.

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{H2CO3} - \Delta H°_{H3O} - \Delta H°_{HCO3}$= .....kJ/mol....
=-285,85-699,65-(-285,81-689,93) =-985,5+975,74= -9.76 $^{kJ}/_{mol}$ **eksotermiska**.....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T = +9.76 / 298.15 = +32.735$.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H2O} + \Delta S°_{H2CO3} - \Delta S°_{H3O} - \Delta S°_{HCO3}$=.....$^{J}/_{mol/K}$....
.....=69,956+187-(-3,854+98,324)= 256,956-94,47= +162,486 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$= +32.735 +162,486=195,221.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
3. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ =-9,76 -298,15*0,162486= -58.2052.....kJ/mol....
.....**eksoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....
$T \bullet \Delta S_{kopēja}$=195,221 $^{J}/_{K/mol} \bullet$298,15 K=+**58,2052**.....kJ/mol....
saistīta TΔSn← zaudēta brīvā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$.Q= -9.76 kJ/mol.....**patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ =-58.2 kJ/mol ....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XI. $CO_{2aqua}$ ūdens molekulām $2H_2O$ ***plaušu*** virsmā, veidojot $H_2CO_3$

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos 298.15 K. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Oglekļa dioksīda ūdens šķīdumā virza $CO_{2aqua}$ reakciju ar ūdens molekulām $2H_2O$ ***plaušu*** epitēlija šūnu virsmas veidojot $H_2CO_3$! Atzīmējiet **eksoerģiska** vai **anenerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| $CO_{2aqua}$ | -413.7976 | 117.5704 |
| $H_2O$ | -285.85 | 69.9565 |
| $H_2CO_3$ | -699,65 | 187.00 |

Izejvielas => produkti

$2\ H_2O + CO_{2aqua} \xrightarrow{\text{Membrānu}} H_2CO_3 + H_2O$ +Q+ΔG

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$.....

. 1. .$\Delta H_r = \Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{H2CO3} - 2\Delta H°_{H2O} - \Delta H°_{CO2aqua}$ = .....$^{kJ}/_{mol}$....
=-285.85-699,65-(2*-285.81—413,7976) =-985.5+985.418= -0,0824 $^{kJ}/_{mol}$ **atermiska**.....
.....Membrānas kanālu šķērsošana ir atermisks-neitrāls process $\Delta H_r$=0.0 $^{kJ}/_{mol}$ bez berzes.
.....Nav siltuma izkliedes membrānas kanālā
.....
.....
.....
$\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T = +0,0824 /298.15= +0,27637.....J/K/mol....
.....Membrānas kanālu šķērsošana ir atermisks-neitrāls process $\Delta H_r$=0.0 $^{kJ}/_{mol}$ bez berzes.
.....Nav siltuma izkliedes membrānas kanālā
.....
.....
.....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H2O} + \Delta S°_{H2CO3} - 2\Delta\ S°_{H2O} - \Delta S°_{CO2aqua}$ =.....J/K/mol....
.....=69.956+187-(117,5704+2*69.956)=256,956-257,4824= -0,5264 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{kopēja}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$= -0,5264+0,27637 = -0,25.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ =-0,0824-298.15*-0,0005264= 0,07455.....kJ/mol....
..... **anenerģiska** vāji **endoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....
T•$\Delta S_{kopēja}$= -0,25 $^{J}/_{K/mol}$•298,15 K=**-0,0745**.....kJ/mol....
saistīta TΔSn← uzkrātā brīvā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ ←Q= +0,0824 kJ/mol...**endoerģiska** $\Delta G_{reakcija}$ =0,0745kJ/mol.....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XII. **$H_2CO_3$** sadalās par **$CO_2$** gāzi un ūdeni **$H_2O$** ***plaušu*** virsmas

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos 298.15 K. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? No ūdens ogļskābe **$H_2CO_3$** sadalās reakcijā par gāzveida oglekļa dioksīdu **$CO_2$** un ūdeni **$H_2O$** ***plaušu*** epitēlija šūnu virsmas nepieciešama siltuma piegāde -sildīšana! Miniet reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$CO_2\uparrow_{gas}$** | -393,509 | 213,74 |
| **$H_2O$** | -285,85 | 69,9565 |
| **$H_2CO_3$** | -699,65 | 187,00 |

Izejvielas => produkti

**$H_2CO_3$ +Q => $H_2O$ + $CO_2\uparrow_{gas}$+ΔG. endotermiska**

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{CO2} - \Delta H°_{H2CO3}$=.....kJ/mol....
....=-285,85-393,509-(-699,65) =-679,359+699,65= +20,291 $^{kJ}/_{mol}$ **endotermiska**.....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{izkliedēta}$= $-\Delta H_r/T$ =-20,291/298,15= -68,056.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H2O} + \Delta S°_{CO2} - \Delta S°_{H2CO3}$=.....J/K/mol....
.....=69,956+213,74-(187)= 257,482-94,47= +96,696 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{kopēja}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$= -68.056 +96,696=28,64.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
3. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ =+20,291-298,15*0, 096696 = -8,538912.....kJ/mol....
.....**eksoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....
T•$\Delta S_{kopēja}$=28,64 $^{J}/_{K/mol}$•298,15 K=**+8.539**.....kJ/mol....
saistīta TΔSn← zaudēta brīvā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$..Q= -20,291 kJ/mol.....**patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ =-8,539 kJ/mol...

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XIII. $O_2\uparrow$gāze asimilācija reakcijā cauri akvaporīniem veido $O_{2aqua\text{-}Asins}$

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos 298.15 K lietojot tabulas datus! Reakcija ir **eksotermiska**, **atermiska**, **endotermiska**? No GAISA ūdenī $O_2\uparrow$gas asimilācija reakcijā cauri membrānu akvaporīniem veido $O_{2aqu\text{-}Asins}$ Cilvēka ķermeņa reakcija Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

Izejvielas => produkti

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| $O_{2aqua}$ | -11,715 | 110,876 |
| $H_2O$ | -285,85 | 69,9565 |
| $O_2\uparrow_{gas}$ | 0,0 | 205,04 |

$O_2\uparrow_{gas\ GAISA} + H_2O + \Delta G \xrightarrow{Akvaporīni} H_2O_{Asins} + O_{2aqua\text{-}Asins} + Q$

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

.$\Delta H_r = \Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{O2aqua\text{-}Asins} - \Delta H°_{H2O} - \Delta H°_{O2gas\text{-}GAISA}$=.....kJ/mol....
.....=(-285,85+-11,715) (-285,85+0,0)= -285,85-11,715+285,85= -11,715 $^{kJ}/_{mol}$ **eksotermiska**....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r/T = 11,715/298.15 = +39,292$.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H2O} + \Delta S°_{O2aqua\text{-}Asins} - \Delta S°_{H2O} - \Delta S°_{O2gas\text{-}GAISA}$ =.....J/K/mol...
.....=69,9565+110,876-(205,04+69,9565)= 180,83-274,997= -94,164 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta} = -94.164+39,292 = -54.872$ .....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
3. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r = -11,715+298.15*0,094164 = +11,715+28.075 = +16.36$.....kJ/mol....
.....**endoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....
$T \bullet \Delta S_{kopēja} = -0,054872^{kJ}/K/_{mol} \bullet 298,15K =$ **-16.36**.....kJ/mol....
saistīta $T\Delta Sn \leftarrow$ uzkrātā enerģija $\Delta G_{pretreakcija} \leftarrow$.Q= +11,715 kJ/mol.ne-**patvaļīga endoerģiska** $\Delta G_{reakcija}$ =+16,363kJ/mol...

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XIV $O_{2aqu}$ no ūdens iztvaikošana GAISĀ $O_2\uparrow$gas zaļajos augos

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos 298.15 K. lietojot tabulas datus**!** Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? $O_{2aqu}$ iztvaikošana GAISĀ $O_2\uparrow$gas reakcijā cauri membrānu akvaporīniem zaļo augu atvārsnītēs! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| $O_{2aqua}$ | -11,715 | 110,876 |
| $H_2O$ | -285,85 | 69,9565 |
| $O_2\uparrow_{gas}$ | 0,0 | 205,04 |
| $H_2O_{\text{gas GAISA}}$ | -241,835 | 188,74 |

Izejvielas => produkti

$H_2O_{Asins} + O_{2aqua-Asins} + Q => O_2\uparrow_{\text{gas GAISA}} + H_2O_{\text{gas GAISA}} + \Delta G$

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

1.$\Delta H_r = \Delta H°_{H2O\ gas\text{-}GAISA} + \Delta H°_{O2gas\text{-}GAISA} - \Delta H°_{H2O} - \Delta H°_{O2aqua}$=.....kJ/mol
....=-241,835+0,0-(-285,85-11,715) =-241,835+297,565= +55,73 $^{kJ}/_{mol}$ **endotermiska**.....
.....kJ/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T = -55,73/298.15= -186,9193 .....J/K/mol....
.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H2O\ gas\text{-}GAISA} + \Delta S°_{O2gas\text{-}GAISA} - \Delta S°_{H2O} - \Delta S°_{O2aqua}$=.....J/K/mol....
.....=205,04+188,74-(69,9565+110,876)= 393,78-180,8325= +212,9475 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{kopēja}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$=212,9475-186,9193= +26,0282.....J/K/mol....
.....
.....
.....
.....
.....
3. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ =+55,73-(298.15*0,2129475) = +55,73-63,4903= -7,76 .....kJ/mol....
..... **eksoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....
T•$\Delta S_{kopēja}$= +0,0260282$^{kJ}/_{K/mol}$•298,15K= **+7,76**.....kJ/mol....
saistīta TΔSn← uzkrātā enerģi $\Delta G_{pretreakcija}$ ←...Q= -55,73 kJ/mol....ne-**patvaļīga eksoerģiska** $\Delta G_{reakcija}$ =-7,76kJ/mol.....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XV Vitamīns $B_3$ $\mathbf{H_3O^+}_{in}$ pārnese $\mathbf{H_3O^+}_{out}$ cauri membrānai

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos 298.15 K lietojot tabulas datus! Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Reakcija ir **endoerģiska** vai **eksoerģiska** ? Reakcija. Vitamīnam B3 reducētā forma NADH un oksidējas veidojot $NADP^+$ pārnesot ūdeņraža jonus kā protonus cauri membrānai no iekšpuses $\mathbf{H_3O^+}_{in}$ uz mitohondrijas ārpusi $\mathbf{H_3O^+}_{out}$.

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| $NADP^+$ | -1007,48 | 577,897 |
| $NADH_{(aq)}$ | -1036,66 | -140,50 |
| $\mathbf{H_3O^+}_{out}$ | -285,81 | -3,854 |
| NADPH | -1036,66 | 763,005 |
| $NAD^+_{(aq)}$ | -1007,48 | -183 |
| $\mathbf{H_3O^+}_{in}$ | -285,81 | -3,854 |

Izejvielas => produkti

$NADP^+ + NADH + \mathbf{H_3O^+}_{in} \xrightarrow{\text{Membrānu}} NADPH + NAD^+ + \mathbf{H_3O^+}_{out} + \Delta G$

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

Protonu trans lokācijas ENZĪMS trans hidrogenāze (EC1.6.1.1) baktērijās un dzīvnieku mitohondrijās kas sakabināts ar reducējošo ekvivalentu pārnesi starp NAD(H) un NADP(H) protonu trans lokācijā cauri membrānai

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{H3Oou} + \Delta H°_{NADPH} + \Delta H°_{NAD+} - \Delta H°_{NADP+} - \Delta H°_{H3Oin} - \Delta H°_{NADH}$ =.....$^{kJ}/_{mol}$....
.....= -1036,66-1007,48 -285,81-(-1007,48-1036,66-285,81)= -2329,95+2329,95= 0.0 $^{kJ}/_{mol}$ **atermiska <u>neitrāla</u>**....
.....Membrānas kanālu šķērsošana ir atermisks-neitrāls process $\Delta H_r$=0.0 $^{kJ}/_{mol}$ bez berzes.
.....Nav siltuma izkliedes membrānas kanālā
.....
.....
.....
$\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T = - 0/298.15= +0,0 ..... $^{J}/_{mol/K}$....
.....Membrānas kanālu šķērsošana ir atermisks-neitrāls process $\Delta H_r$=0.0 $^{kJ}/_{mol}$ bez berzes.
.....Nav siltuma izkliedes membrānas kanālā
.....
.....
.....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H3Oou} + \Delta S°_{NADP+} + \Delta S°_{NADH} - \Delta S°_{NADPH} - \Delta S°_{H3Oin} - \Delta S°_{NAD+}$ =.....$^{J}/_{mol/K}$....
.....= 763,005-183-3,854-(577,897-140,50-3,854)= 576,2-433,543= +142,6 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....
.....
.....
.....
.....
$\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$= 0,0 +142,6= = +142,6.....$^{J}/_{mol/K}$....
.....
.....
.....
.....
.....
3. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ =0,0-298,15*(+142,6)/1000= -42,516 ..... $^{kJ}/_{mol}$....
..... **eksoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....
$T \bullet \Delta S_{kopēja}$=-142,6 $^{J}/K/_{mol} \bullet$298,15 K=**+42.516**..... $^{kJ}/_{mol}$....
saistīta $T\Delta Sn \leftarrow$ <u>zaudēta enerģija protona gradientā</u> $\mathbf{H^+}_{out}$.Q= +0,0kJ/mol....**patvaļīga eksoerģiska** $\Delta G_{reakcija}$=-42,516 kJ/mol...

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XVI. NAD**H**+$\mathbf{H_3O^+}$ +$\mathbf{O_{2aqua}}$←$^{FMN(B2vitamin)}$→$NAD^+$+$\mathbf{H_2O}$+$\mathbf{H_2O_{2aqua}}$+ΔG+**Q**

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standarta apstākļos 298.15 K, lietojot tabulas datus! Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska** ir **endoerģiska** vai **eksoerģiska**? Vitamīna B3 reducētā forma NADH vai NADPH flavīna B2 vitamīna FMN enzīms lietojot skābekli $\mathbf{O_{2aqua}}$ kā elektronu akceptoru oksidē NADH producējot ūdeņraža peroksīdu. Reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| $\mathbf{O_{2aqua}}$ | -11,715 | 110,876 |
| NAD**H**$_{(aq)}$ | -1036,66 | -140,50 |
| $\mathbf{H_3O^+}$ | -285,81 | -3,854 |
| $\mathbf{H_2O}$ | -285,85 | 69,9565 |
| $NAD^+_{(aq)}$ | -1007,48 | -183 |
| $\mathbf{H_2O_{2aqua}}$ | -191,17 | 143,9 |

Izejvielas => produkti

NAD**H**+$\mathbf{H_3O^+}$ +$\mathbf{O_{2aqua}}$ $^{FMN(B2vitamin)}$=>$NAD^+$+$\mathbf{H_2O}$+$\mathbf{H_2O_{2aqua}}$+ΔG+**Q**

1. $\Delta H_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S_{reakcija} = \Sigma\Delta S°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G_{reakcija} = \Delta H_{reakcija} - T \bullet \Delta S_{reakcija}$

NADH un NADPH oksidāze ENZĪMS (EC 1.6.99.1)

$1\Delta H_r = \Delta H°_{\mathbf{H2O2aqua}} + \Delta H°_{\mathbf{H2O}} + \Delta H°_{\mathbf{NAD+}} - \Delta H°_{\mathbf{H3O+}} - \Delta H°_{\mathbf{O2aqua}} - \Delta H°_{\mathbf{NADH}} = ...$

$\Delta H_r$ = -1007,48 -191,17-285,85-(-1036,66-11,715-285,81)= -1484,5+1334,185= -150,315 $^{kJ}/_{mol}$ **eksotermiska**.....

.....$^{kJ}/_{mol}$....

.....

.....

.....

.....

.....

$.\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T$ = +150,315/298.15= +504,0416 .....$^{J}/_{mol/K}$....

.....

.....

.....

.....

.....

2. $\Delta S_r = \Delta S°_{\mathbf{H2O2aqua}} + \Delta S°_{\mathbf{H2O}} + \Delta S°_{\mathbf{NAD+}} - \Delta S°_{\mathbf{H3O+}} - \Delta S°_{\mathbf{O2aqua}} - \Delta S°_{\mathbf{NADH}}$ =.....$^{J}/_{mol/K}$....

.....= -183+143,9+69,9565-(110,876-140,50-3,854)= -39,1-29,624=+64,335 $^{J}/_{mol/K}$....

.....

.....

.....

.....

.....

3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$= +64,335+504,0416= +568,3766.....$^{J}/_{mol/K}$....

.....

.....

.....

.....

.....

$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ =-150,315-298,15*(+64,335)/1000= -150,315 – 19,1815 = -169,5..... $^{kJ}/_{mol}$ l....

.....$^{kJ}/_{mol}$ l....

..... **eksoerģiska**.....

.....

.....

.....

.....

$T \bullet \Delta S_{kopēja}$= +568,3766 $^{J}/K/_{mol} \bullet$298,15 K=**+169.5**..... $^{kJ}/_{mol}$....

saistīta TΔSn← zaudēta enerģija NAD**H** +$\mathbf{O_{2aqua}}$+$\mathbf{H_3O^+}$Q= +150,315kJ/mol.**patvaļīga eksoerģiska** $\Delta G_{reakcija}$=-169,5 $^{kJ}/_{mol}$....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XVII Peroksīda 1**$2H_2O_{2(aq)}$** pārvēršana par => **$O_{2aqua}$ + $2H_2O$ + Q**

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$**.** Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**?
Peroksīda **2H:-••:O-:-O:••-:H** pārvēršanaiās par **$O_{2aqua}$ +$2H_2O$ +Q** cilvēka temperatūrā (37 C) 310.15 K, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**! Izejviela oeroksīds => produkti skābeklis(aqua) + ūdens

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$H_2O_{2\ (aq)}$** | -191,17 | 143,9 |
| **$O_{2aqua}$** | -11,715 | 110,876 |
| **$H_2O$** | -285,85 | 69,9565 |

**$2H_2O_{2(aq)}$ => $O_{2aqua}$ + $2H_2O$ + Q + ΔG**

1. $\Delta H°_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S°_{reakcija} = \Sigma\Delta S°°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G°_{reakcija} = \Delta H°_{reakcija} - T•\Delta S°_{reakcija}$

1. $\Delta H_r = 2\Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{O2} - 2\Delta H°_{H2O2}$=.....$^{kJ}/_{mol}$
.....=-11,715-2*285,85-(2*-191,17) =-.133407583,4+383,415= -201,08 $^{kJ}/_{mol}$ **eksotermiska**....
.....
.....
.....
.....
.....

2. $\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T = -(-201,08) /310,15 = 648,33$ .....$^{J}/_{mol/K}$ l
.....
.....
.....
.....
.....

$\Delta S_r = 2\Delta S°_{H2O} + \Delta S°_{O2} - 2\Delta S°_{H2O2}$=.....$^{J}/_{mol/K}$
.....=110,876+2*69,9565-(2*143,9)=250,789-287,8= -37,011 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....
.....
.....
.....
.....

3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$=-37,011+648,33 = +611,319..... $^{J}/_{mol/K}$
.....
.....
.....
.....
.....

4. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = -201,08-310,15*-0,037011 = -201,08+11,478962 = -189,601.....$^{kJ}/_{mol}$
.....**eksoerģiska**.....
.....
.....
.....
.....

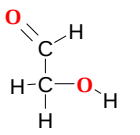
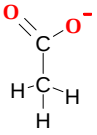
$T•\Delta S_{kopēja}$=0,611319*310,15= **+189,6**.....$^{kJ}/_{mol}$
saistīta TΔSn← izkliedētā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ ←....Q= -201,08 kJ/mol.....**patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ = -189,6 kJ/mol....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XVIII Glikolaldehīds **$H_2C(OH)CHO$** pārvēršana **$H_3CCOO^- + H_3O^+ + Q$**

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**?
Glikolaldehīds **$H_2C(OH)CHO$** pārvēršana acetātā **$H_3CCOO^- + H_3O^+ + Q$** (25 C) 298.15 K,, lietojot tabulas datus!
Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**! Izejviela glioksāls=> produkti acetāts + ūdens

| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| $H_2C(OH)CHO$ | -212 | 272,5 |
| **$H_3CCOO^-$** | -486 | 85.3 |
| **$H_2O_{(aq)}$** | -285.85 | 69,96 |
| **$H_3O^+_{(aq)}$** | -285.81 | -3,854 |

Glikolaldehīds  **+ $H_2O$ =>**  **+ $H_3O^+$ + ΔG + Q**

**$H_2C(OH)CHO + H_2O$ => $H_3CCOO^- + H_3O^+ + Q + \Delta G$**

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{H_3CCOO^-} + \Delta H°_{H3O} - \Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{H_2C(OH)CHO} = {}^{kJ}/_{mol}$.....$^{kJ}/_{mol}$.....
..... =-486-285,81-(-212-285,85)= -770,11+497,85= -273,96- $^{kJ}/_{mol}$ **eksotermiska**....
2. $\Delta S_{izkliedēta}$-= $\Delta H_r$/ T = 273.96/298.15= +918,966 ..... $^{J}/_{mol/K}$ l
$\Delta S_r$==$\Delta S°_{CH3COO} + \Delta S°_{H3O} - \Delta S°_{H2O} - \Delta S°_{H_2C(OH)CHO}$ =.....$^{J}/_{mol/K}$.....
.....=85,3-3,854-(69,96+272,5)= 81,446+-342,46= -261,014 $^{J}/_{mol/K}$....
3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$=918,966-261,014 = 657,952 $^{J}/_{mol/K}$..... $^{J}/_{mol/K}$
**4**$\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ =-273,96+298,15*0,261014= -196,139..... **eksoerģiska**..... $^{kJ}/_{mol}$
T•$\Delta S_{kopēja}$= +657,952$^{J}$/K/$_{mol}$•298,15 K= **+196,168**..... $^{kJ}/_{mol}$
saistīta TΔSn← izkliedētā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ ←....Q= +273,96 $^{kJ}/_{mol}$.....**patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ = -196,14 $^{kJ}/_{mol}$.....

**Formation in space.** UV-irradiation of methanol ices containing CO yielded organic compounds such as glycolaldehyde and methyl formate, the more abundant isomer of glycolaldehyde.
Ethylene Glycol and glycolaldehyde require temperatures above 30 K.[12][13] The most consistent formation reakcijas seems to be on the surface of ice in cosmic dust. Glycolaldehyde has been identified in gas and dust near the center of the Milky Way galaxy,[16] in a star-forming region 26000 light-years from Earth,[17] and around a protostellar binary star, *IRAS 16293-2422*, 400 light years from Earth.[18][19] Observation of in-falling glycolaldehyde spectra 60 AU from *IRAS 16293-2422* suggests that complex organic molecules may form in stellar systems prior to the formation of planets, eventually arriving on young planets early in their formation.[13]
**Detection in space.** The interior region of a dust cloud is known to be relatively cold. With temperatures as cold as 4 Kelvin the gases within the cloud will freeze and fasten themselves to the dust, which provides the reakcija conditions conducive for the formation of complex molecules such as glycolaldehyde. When a star has formed from the dust cloud, the temperature within the core will increase. This will cause the molecules on the dust to evaporate and be released. The molecule will emit radio waves that can be detected and analyzed. The Atacama Large Millimeter/submilliter Array (ALMA) first detected glycolaldehyde. ALMA consists of 66 antennas that can detect the radio waves emitted from cosmic dust.[20]
On October 23, 2015, researchers at the Paris Observatory announced the discovery of glycolaldehyde and ethyl alcohol on Comet Lovejoy, the first such identification of these substances in a comet.[21][22]
Glycolaldehyde is formed from many sources, including the amino acid glycine and from purone catabolism. It can form by action of ketolase on fructose 1, 6-bisphosphate in an alternate glycolysis pathway. This compound is transferred by thiamin pyrophosphate during the pentose phosphate shunt. InTissue neurons; Mitochondria;
**Solar-type protostar with ALMA.** Glycolaldehyde (HCOCH2OH) is the simplest sugar and an important intermediate in the path toward forming more complex biologically relevant molecules. First detection of 13 transitions of glycolaldehyde around a solar-type young star, through Atacama Large Millimeter Array (ALMA) observations of the Class 0 protostellar binary IRAS 16293-2422 at 220 GHz (6 transitions) and 690 GHz (7 transitions). Glycolaldehyde co-exists with its isomer, methyl formate (HCOOCH3), which is a factor 10-15 more abundant toward the two sources. The data also show a tentative detection of ethylene glycol, the reduced alcohol of glycolaldehyde. In the 690 GHz data, the seven transitions predicted to have the highest optical depths based on modeling of the 220 GHz lines all show red-shifted absorption profiles toward one of the components in the binary (IRAS16293B) indicative of infall and emission at the systemic velocity offset from this by about 0.2" (25 AU). We discuss the constraints on the chemical formation of glycolaldehyde and other organic species - in particular, in the context of laboratory experiments of photochemistry of methanol-containing ices. The relative abundances appear to be consistent with UV photochemistry of a CH3OH-CO mixed ice that has undergone mild heating. The order of magnitude increase in line density in these early ALMA data illustrate its huge potential to reveal the full chemical complexity associated with the formation of solar system analogs.

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XIX Glikolskābes $H_2COH$-COOH pārvēršana $H_3C$-COOH **+Q**

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$**.** Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**?
Glycolic acid $H_2COH$-COOH convertion to acetate $H_3C$-COOH **+Q** (25 C) 298.15 K,, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

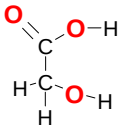
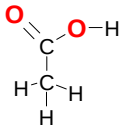
| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| $H_2COHCOOH$ | - 651 | 318,6 |
| NAD**H**$_{(aq)}$ | -1036,66 | -140,5 |
| **$H_3O^+_{(aq)}$** | -285.81 | -3,854 |
| **$H_3C$-COOH** | -480.6 | 85.3 |
| $NAD^+_{(aq)}$ | -1007,48 | -183 |
| **$H_2O_{(aq)}$** | -285.85 | 69,96 |

Izejviela glikolskābe => produkti acetāts + ūdens

$H_2COH$-COOH+NADH+$H_3O^+$=> $H_3C$-COOH+$NAD^+$+2$H_2O$**+Q**

B3 vitamin => reduction

1. $\Delta H°_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S°_{reakcija} = \Sigma\Delta S°°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G°_{reakcija} = \Delta H°_{reakcija} - T \bullet \Delta S°_{reakcija}$

Glikolskābe  + NADH + **$H_3O^+$** => etiķskābe  + **2$H_2O$** + $NAD^+$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{CH3COOH} + 2\Delta H°_{H2O} + \Delta H°_{NAD+} - \Delta H°_{H3O} - \Delta H°_{H_2COH\text{-}COOH} - \Delta H°_{NADH}$ = $^{kJ}/_{mol}$.....$^{kJ}/_{mol}$...
.....= -480,6-1007,48-2*285,85-(-651-1036,66-285,81)= -2059,78+1973,47= -86,31- $^{kJ}/_{mol}$ **eksotermiska**....
.....
.....
2. $\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T = -86,31/298.15= +289,485..... $^{J}/_{mol/K}$ l
.....
.....
$\Delta S_r = \Delta S°_{CH3COOH} + 2\Delta S°_{H2O} + \Delta S°_{NAD+} - \Delta S°_{H3O} - \Delta S°_{H_2COH\text{-}COOH} - \Delta S°_{NADH}$ =.....$^{J}/_{K/mol}$....
.....
.....=85,3-183+2*69,956-(318,6-140,50-3,854)= 42,212+-174,246= -132 $^{J}/_{mol/K}$.....
.....
3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta}$= 289,485 -132= +157,485 $^{J}/_{mol/K}$..... $^{J}/_{mol/K}$
.....
**4**. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = -86,31+298,15*0,132= -46,9542 ..... $^{kJ}/_{mol}$.....
.....**eksoerģiska**.....
.....
T•$\Delta S_{kopēja}$= +157,485 $^{J}/_{K/mol}$•298,15 K= **+46,9542**..... $^{kJ}/_{mol}$
saistīta T$\Delta$Sn← izkliedētā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ ←....Q=+86,31 $^{kJ}/_{mol}$.....**patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ = -46,9542$^{kJ}/_{mol}$.....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XX Piruvāta **$H_3CC=OCOO^-$** dekarboksilēšana **$H_3CCHO + HCO_3^-$**

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**?
Piruvāta **$H_3CC=OCOO^-$** pārvēršana acetaldehīdā **$H_3CCHO + HCO_3^-$** (25 C) 298.15 K,, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

Izejviela pirovīnogskābe => produkti bicarbonāts

| *Viela* | $\Delta H°_r$, kJ/mol | $\Delta S°_r$, J/mol/K |
|---|---|---|
| **$H_3CC=OCOOH_{(aq)}$** | -607,82 | 179,91 |
| **$H_3CC=OCOO^-_{(aq)}$** | -603,7 | -433,54 |
| **$H_3CCHO_{(aq)}$** | -212,23 | **160,2** |
| **$H_3CCHO_l$** | -192,2 | **160,2** |
| **$H_2O_{(aq)}$** | -285,85 | 69,96 |
| **$H_3O^+_{(aq)}$** | -285,81 | -3,854 |
| **$HCO_3^-$** | -689,93 | 98,324 |

**$H_3CC=OCOOH + 2\,H_2O + \Delta G + Q \Rightarrow H_3CCHO + H_3O^+ + HCO_3^-$**

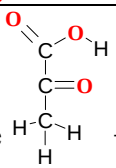
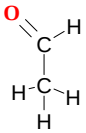
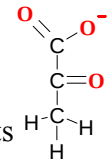
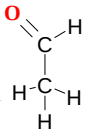
**$H_3CC=OCOO^- + H_2O + \Delta G + Q \Rightarrow H_3CCHO + HCO_3^-$**

1. $\Delta H°_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$

MassachusettsTinstitute

**CRC**

2. $\Delta S°_{reakcija} = \Sigma\Delta S°°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G°_{reakcija} = \Delta H°_{reakcija} - T \cdot \Delta S°_{reakcija}$

Pirovīnogskābe  $+2H_2O+\Delta G+Q \Rightarrow$  $+H_3O^+ + HCO_3^-$; Piruvāts  $+H_2O+\Delta G+Q \Rightarrow$  $+HCO_3^-$

1. $\Delta H_r = \Delta H°_{H3CCHO} + \Delta H°_{H3O} + \Delta H°_{HCO3} - 2\,\Delta H°_{H2O} - \Delta H°_{H3CC=OCOOH} = -8,45$ kJ/mol.... MassachusettsTinstitute
.....=-212,23-285,81-689,93-(-2*285,85-607,82)= -1187,97+1179,52= -8,45 kJ/mol **eksotermiska**....
1. $\Delta H_r = \Delta H°_{H3CCHO} + \Delta H°_{H3O} + \Delta H°_{HCO3} - 2\,\Delta H°_{H2O} - \Delta H°_{H3CC=OCOOH} = +11,58$ kJ/mol.....
.....=-192,2-285,81-689,93-(-2*285,85-607,82)= -1187,97+1179,52=11,58 kJ/mol **endotermiska**....
1. $\Delta H_r = \Delta H°_{H3CCHO} + \Delta H°_{HCO3} - \Delta H°_{H2O} - \Delta H°_{H3CC=OCOO^-} = +7,42$ kJ/mol.....
.....=-192,2-689,93-(-285,85-603,7)= -882,13+889,55= +7,42kJ/mol **endotermiska**....
2. $\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T = 8,45/298,.15 = +28,35$ .....J/K/mol.... MassachusettsTinstitute
2. $\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T = -11,58/298,.15 = -38,8395$.....J/K/mol....
2. $\Delta S_{izkliedēta} = -\Delta H_r / T = -7,42/298,.15 = -24,8868$.....J/K/mol....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H3CCHO} + \Delta S°_{H3O} + \Delta S°_{HCO3} - 2\Delta S°_{H2O} - \Delta S°_{H3CC=OCOOH} =$.....J/mol/K.... MassachusettsTinstitute
.....= 160,2-3,854+98,324-(2*69,96+179,91)= -187,368 -319,83= -65,16 J/mol/K....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H3CCHO} + \Delta S°_{H3O} + \Delta S°_{HCO3} - 2\Delta S°_{H2O} - \Delta S°_{H3CC=OCOOH} =$.....J/mol/K....
.....=160,2+98,324-(69,96+179,91)= 254,67 -319,83=-65,16 J/mol/K....
2. $\Delta S_r = \Delta S°_{H3CCHO} + \Delta S°_{HCO3} - \Delta S°_{H2O} - \Delta S°_{H3CC=OCOO^-} =$.....J/mol/K....
.....=160,2-3,854+98,324-(69,96-433,54)= 258,524 -249,87=8,654 J/mol/K...
3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta} = -65,16-28,35 = -36,81$ J/mol/K..... MassachusettsTinstitute J/mol/K
3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta} = -65,16-38,8395 = -104$ J/mol/K..... J/mol/K
3. $\Delta S_{kopēja} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliedēta} = 8,654-24,8868 = -16,233$ J/mol/K..... J/mol/K
4. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r = -8,45-298,15*-0,06516 = +10,98$.....kJ/mol MassachusettsTinstitute.....**endoerģiska**...
4. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r = 11,58-298,15*-0,06516 = +31,01$.....kJ/mol...**endoerģiska**...
4. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r = 7,42-298,15*0,008654 = +4,84$.....kJ/mol....**endoerģiska**...
$T \cdot \Delta S_{kopēja} = -36,81$ J/K/mol•298,15 K= **-10,97**.....kJ/mol....MassachusettsTinstitute
saistīta $T\Delta Sn \leftarrow$ izkliedētā enerģija $\Delta G_{pretreakcija} \leftarrow$....Q=-8,45 kJ/mol.....**ne patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ = 10,98 kJ/mol...
$T \cdot \Delta S_{kopēja} = -104$ J/K/mol•298,15 K= **-31,01**..... kJ/mol ....
saistīta $T\Delta Sn \leftarrow$ izkliedētā enerģija $\Delta G_{pretreakcija} \leftarrow$....Q=11,58 kJ/mol.....**ne patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ = 31,01 kJ/mol...
$T \cdot \Delta S_{kopēja} = -16,233$ J/K/mol•298,15 K= **-4,84**..... kJ/mol....
saistīta $T\Delta Sn \leftarrow$ izkliedētā enerģija $\Delta G_{pretreakcija} \leftarrow$....Q=7,42 kJ/mol.....**ne patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ = 4,84 kJ/mol...

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XXI Laktata $H_3CCH(OH)COO^-_{aq}$ dekarboksilēšana $H_3CCH_2OH+HCO_3^-$

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**?
Piruvāta **$H_3CC=OCOO^-$** pārvēršana acetātā **$H_3CCHO$ $+HCO_3^-$** (25 C) 298.15 K, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**! Izejviela laktats=> produkti etanols + bikarbonāts

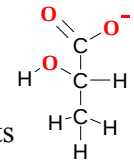
| *Viela* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$H_3CCH(OH)COO^-_{aq}$** | -686,2 | -557,71 |
| **$H_3CCH_2OH_l$** | -277,6 | 160,7 |
| **$H_2O_{(aq)}$** | -285,85 | 69,96 |
| **$HCO_3^-$** | -689,93 | 98,324 |

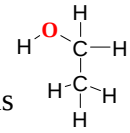
**$H_3CCH(OH)COO^-_{aq}+H_2O+Q => H_3CCH_2OH_l+HCO_3^-$ $+\Delta G$**

1. $\Delta H°_{reakcija}= \Sigma\Delta H°_{produkti}- \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$

**CRC**

2. $\Delta S°_{reakcija}= \Sigma\Delta S°°_{produkti}- \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G°_{reakcija} = \Delta H°_{reakcija} -T•\Delta S°_{reakcija}$



Laktāts +**$H_2O$**+$\Delta G$ +**Q** =>Etanols  **+$HCO_3^-$**

1. $\Delta H_r=\Delta H°_{H3CCH2OH} + \Delta H°_{HCO3^-} - \Delta H°_{H2O} - \Delta H°_{H3CCH2OHCOO-}$ = 4,52 $^{kJ}/_{mol}$.....
.....= -277,6-689,93-(-285,85-686,2)= -967,53+972,06= +4,52 $^{kJ}/_{mol}$ **endotermiska**...
.....
.....
2. $\Delta S_{izkliedēta}$= - $\Delta H_r$/ T = -4,52/298,15= -15,16..... $^{J}/_{mol/K}$ l
.....
.....
2. $\Delta S_r=\Delta S°_{H3CCH2OH} + \Delta S°_{HCO3^-} - \Delta S°_{H2O} - \Delta S°_{H3CCH2OHCOO-}$ =.....$^{J}/_{mol/K}$....
.....= 160,7+98,324-(69,96-557,71)= 259,02 + 487,75= 746,77 $^{J}/_{mol/K}$....
.....
.....
3. $\Delta S_{kopēja}= \Delta S_r+ \Delta S_{izkliedēta}$=-15,16 +746,77 = 731,61 $^{J}/_{mol/K}$..... $^{J}/_{mol/K}$
.....
**4**. $\Delta G_r = \Delta H_r – T*\Delta S_r$ =4,52-298,15*0,74677= -218,13 ..... $^{kJ}/_{mol}$.....
.....**eksoerģiska**.....
.....
$T•\Delta S_{kopēja}$= 731,61 $^{J}/K/_{mol}$•298,15 K= **218,13**..... $^{kJ}/_{mol}$
saistīta TΔSn← izkliedētā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ ←....Q= -4,52 $^{kJ}/_{mol}$.....**patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ = - 218,13 $^{kJ}/_{mol}$.....

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

THERMODYNAMICS Exercise XXII alanine $H_3CCHNH_3^+COO^-$ deamination pyruvate **$H_3CC{=}OCOO^-$**

Fizioloģiski apstākļi pH=7,36 T=310,15 K (37° C)

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ un siltuma daudzumu **eksotermiska**, **atermiska** vai **endotermiska** reakcija standarta apstākļos 310.15 K. Alanīns deaminēšana par pirovīnogskābi un piruvātu **$H_3CC{=}OCOO^-$** (37 C) 310.15 K, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

Izejviela alanīns + $O_{2aqua}$ => produkts piruvāts+$NH_3$+$H_3O^+$+Q+ΔG

| *Substance* | $\Delta H°_r$, $^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°_r$, $^{J}/_{mol/K}$ |
|---|---|---|
| **$H_3CC{=}OCOOH_{(aq)}$** | -607,82 | 179,91 |
| **$H_3CC{=}OCOO^-_{(aq)}$** | -603,7 | -433,54 |
| $H_3CCHNH_3^+COO^-_{(aq)}$ | -554,80 | -616,47 |
| **$NH_4^+{}_{(aq)}$** | -132,5 | 113,4 |
| **$NH_{3(aq)}$** | -76,44 | -90,65 |
| **$H_2O_{(aq)}$** | -285,85 | 69,96 |
| **$H_3O^+_{(aq)}$** | -285,81 | -3,854 |
| **$O_{2aqua}$** | -11,715 | 110,876 |

1. $\Delta H°_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S°_{reakcija} = \Sigma\Delta S°°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G°_{reakcija} = \Delta H°_{reakcija} - T\bullet\Delta S°_{reakcija}$ **CRC**

**$NH_4^+{}_{(aq)} + H_2O + \Delta G + Q \Rightarrow H_3O^+ + NH_{3(aq)}$**

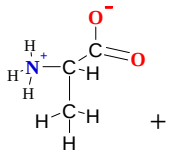
$\Delta G°_{NH4}$=-79,3;$\Delta G°_{H3O}$=-213,27;$\Delta G°_{H2O}$=-237,19;$\Delta G°_{NH4}$=-79,3

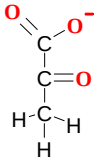
$\Delta G°_{NH3} = \Delta G_r - \Delta G°_{H3O} + \Delta G°_{NH4} + \Delta G°_{H2O}$ = -48,326

pKa=9,245 ; $\Delta G_r = -RTln(10^{-pKa})$= 54,894

$\Delta G_r = \Delta G°_{NH3} + \Delta G°_{H3O} - \Delta G°_{NH4} - \Delta G°_{H2O}$ = 54,894

=54,894 -(-213,27) +(-79,3) +(-237,19) = -48,326



D-Alanīns 2 + $O_{2aqua}$ +2 $H_2O$ + Q => Piruvāts 2  + 2 $NH_{3(aq)}$ + $H_3O^+$ +ΔG

$H_3CCHNH_3^+COO^-_{(aq)} + O_{2aqua} + 2\ H_2O + Q \Rightarrow H_3CC{=}OCOO^-_{(aq)} + 2\ NH_{3(aq)} + H_3O^+ + \Delta G$

$H_3CCHNH_3^+COO^-_{(aq)} + O_{2aqua} + H_2O \Rightarrow H_3CC{=}OCOO^-_{(aq)} + 2\ NH_4^+{}_{(aq)} + \Delta G + Q$

1. $\Delta H_r = 2\Delta H°_{H3CC=OCOO-} + 2\Delta H°_{NH3} + \Delta H°_{H3O} - 2\Delta H°_{alanine} - \Delta H°_{O2} - 2\Delta H°_{H2O}$ = 46,925 **endothermic**..... $^{kJ}/_{mol}$

... =2*-603,7+2*-76,44-285,81-(2*-554,8-11,715+2*-285,85)= -1646,09+1693,015=46,925 endothermic..... $^{kJ}/_{mol}$

1. $\Delta H_r = 2\Delta H°_{H3CC=OCOO-} + 2\Delta H°_{NH4} - 2\Delta H°_{alanine} - \Delta H°_{O2} - \Delta H°_{H2O}$ = -643 **eksotermiska**..... $^{kJ}/_{mol}$

... =2*-603,7+2*-132,5-(2*-554,8-11,715-285,85) = -1472,4+1407,165= -65,235 **eksotermiska**..... $^{kJ}/_{mol}$

2.$\Delta S_{izkliede}$= $-\Delta H_r/T$=-46,925/310,15= -151,298..... $^{J}/_{K/mol}$...

2.$\Delta S_{izkliede}$= $-\Delta H_r/T$=65,235/310,15= 210,334..... $^{J}/_{K/mol}$...

2. $\Delta S_r = 2\Delta S°_{H3CC=OCOO-} + 2\Delta S°_{NH3} + \Delta S°_{H3O} - 2\Delta S°_{alanine} - \Delta S°_{O2} - 2\ \Delta S°_{H2O}$ =209,75…..... $^{J}/_{mol/K}$...

.....=2*-433,54+2*-90,65-3,854-(2*-616,47+110,876-2*69,96)= -1052,234+1261,984=209,75..... $^{J}/_{mol}$

2. $\Delta S_r = 2\Delta S°_{H3CC=OCOO-} + 2\Delta S°_{NH4} - 2\Delta S°_{alanine} - \Delta S°_{O2} - \Delta S°_{H2O}$ =143,644…..... $^{J}/_{mol/K}$...

.....=2*-433,54+2*113,4-(2*-616,47+110,876-69,96)= -640,28+1192,024=551,744..... $^{J}/_{mol}$

3. $\Delta S_{kopējs} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliede}$=209,75-151,298= 58,452 $^{J}/_{mol/K}$..... $^{J}/_{mol/K}$

3. $\Delta S_{kopējs} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliede}$=551,744+210,334= 762,078 $^{J}/_{mol/K}$..... $^{J}/_{mol/K}$

4. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$=46,925-310,15*0,20975=46,925-65,05= -18,13.....**eksoerģiska**... $^{kJ}/_{mol}$

4. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$= -65,235-310,15*0,551744=-65,235-171,12= -236,3584.....**eksoerģiska**... $^{kJ}/_{mol}$

$T\bullet\Delta S_{kopējs}$= 58,452 $^{J}/_{K/mol}\bullet$310,15 K= **18,13**..... $^{kJ}/_{mol}$.....

$T\bullet\Delta S_{kopējs}$=762,078 $^{J}/_{K/mol}\bullet$310,15 K= **236,36**..... $^{kJ}/_{mol}$.....

saistītā $T\Delta Sn \leftarrow$ izkliedes enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ Q=65,2 $^{kJ}/_{mol}$ **patvaļīga** $\Delta G_{reaction}$= -236,36..... $^{kJ}/_{mol}$

$pK_{eq}$=-log($K_{eq}$)=-ln(10)*(-$\Delta G_r$ /R/T)=-ln(10)*(**18,13** *1000/8,3144/310,15)= -ln(10)*7,03064= -1,95028.....

$pK_{eq}$=-log($K_{eq}$)=-ln(10)*(-$\Delta G_r$ /R/T)=-ln(10)*(**236,36** *1000/8,3144/310,15)= -ln(10)*91,6576= -4,51806.....

$K_{eq}$ =EXP(-$\Delta G_r$ /R/T)= $10^{-pKeq}$=$10^{1,95028}$=8,92*$10^1$ temperature 310,15 K (37° C)

$K_{eq}$ =EXP(-$\Delta G_r$ /R/T)= $10^{-pKeq}$=$10^{4,51806}$=3,3*$10^4$ temperature 310,15 K (37° C)

**$NH_4^+{}_{(aq)} + H_2O + \Delta G + Q \Rightarrow H_3O^+ + NH_{3(aq)}$** pKa=9,245 ; $\Delta G_r = -RTln(10^{-pKa})$ = 54,894

4. $\Delta G_r = \Delta G°_{NH3} + \Delta G°_{H3O} - \Delta G°_{NH4} - \Delta G°_{H2O}$ = 54,894 ..... $^{kJ}/_{mol}$

4. $\Delta G_r = -RTln(10^{-9,245})$= -8,3144*310,15*-21,2874=8,3144*6602,29=54894,05 $^{J}/_{mol}$ =54,894..... $^{kJ}/_{mol}$

4. $\Delta G°_{NH3} = \Delta G_r - \Delta G°_{H3O} + \Delta G°_{NH4} + \Delta G°_{H2O}$ =54,894 -(-213,27) +(-79,3) +(-237,19) = -48,326 ..... $^{kJ}/_{mol}$

4. $\Delta S°_{NH3} = (\Delta H°_{NH3} - \Delta G°_{NH3})/T$ =(-76,44-(-48,326))/310,15 = 90,65 ..... $^{J}/_{mol/K}$

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

THERMODINAMIKA vingrinājums XXIID(a) alanīna $H_3CCHNH_3^+COO^-$ deaminēšana par piruvātu **$H_3CC{=}OCOO^-$**

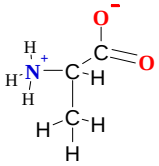
Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ un siltuma daudzumu **eksotermiska**, **atermiska** vai **endotermiska** reakcija standarta apstākļos 298.15 K. Alanīns deaminēšana par pirovīnogskābi un piruvātu **$H_3CC{=}OCOO^-$** (25 C) 298.15 K, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

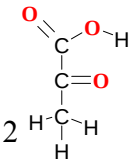
Izejviela alanīns + $O_{2aqua}$ => produkts piruvāts+$NH_4OH$+$H_3O^+$+Q

| *Viela* | $\Delta H°_r$, kJ/mol | $\Delta S°_r$, J/mol/K |
|---|---|---|
| **$H_3CC{=}OCOOH_{(aq)}$** | -607,82 | 179,91 |
| **$H_3CC{=}OCOO^-_{(aq)}$** | -603,7 | -433,54 |
| $H_3CCHNH_3^+COO^-_{(aq)}$ | -554,80 | -616,47 |
| **$HO^-NH_4^+_{(l)}$** | -361,2 | 165,6 |
| **$H_2O_{(aq)}$** | -285,85 | 69,96 |
| **$H_3O^+_{(aq)}$** | -285,81 | -3,854 |
| **$O_{2aqua}$** | -11,715 | 110,876 |

1. $\Delta H°_{reakcija} = \Sigma\Delta H°_{produkti} - \Sigma\Delta H°_{izejvielas}$
2. $\Delta S°_{reakcija} = \Sigma\Delta S°°_{produkti} - \Sigma\Delta S°_{izejvielas}$
3. $\Delta G°_{reakcija} = \Delta H°_{reakcija} - T\bullet\Delta S°_{reakcija}$ **CRC**

1.$\Delta H_r = 2\Delta H°_{H3CC=OCOOH} + 2\Delta H°_{NH4OH} - 2\Delta H°_{alanīns} - \Delta H°_{O2} - 2\Delta H°_{H2O}$=
=2*-607,82+2*-361,2-689,93-(2*-554,8-11,715+2*-285,85)=
= -2627,97+1693,015= -934,955 kJ/mol **eksotermiska**.....
2.$\Delta S_{izkliede}$= $-\Delta H_r/T$=934,955/298,15= 3135,85.....J/K/mol

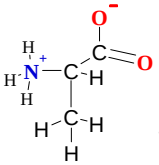


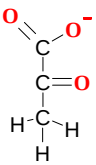
Alanīns 2 + $O_{2aqua}$ +2 $H_2O$ => Pirovīnogskābe 2  + 2 $NH_4OH$ +ΔG +Q

$H_3CCHNH_3^+COO^-_{(aq)}$ + $O_{2aqua}$ +2 $H_2O$=> $H_3CC{=}OCOOH_{(aq)}$ + 2 $NH_4OH$ +ΔG +Q

2. $\Delta S_r = 2\Delta S°_{H3CC=OCOOH} + 2\Delta S°_{NH4OH} - 2\Delta S°_{alanīns} - \Delta S°_{O2} - 2\Delta S°_{H2O}$ =.....J/mol/K....
.....=2*179,91+2*165,6-(2*-616,47+110,876+2*69,96)= 691,02 -982,4=1673,164 J/mol/K.....
3. $\Delta S_{kopējā} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliede}$=1673,164+3135,85= 4809,01 .....J/mol/K
4. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = -934,955-298,15*1,673164= -1433,809.....kJ/mol **eksoerģiska**....
$T\bullet\Delta S_{kopējā}$=4809,01 J/K/mol•298,15 K= **1433,81**.....kJ/mol.....
saistītā TΔSn← izkliedētā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ Q=935 kJ/mol **patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ = -1433 kJ/mol...

Fizioloģiskos apstākļos pH=7,36 T=310,15 K (25° C)



Alanīns 2 + $O_{2aqua}$ +3 $H_2O$ => Piruvāts 2  + 2 $NH_4OH$ + $H_3O^+$ +ΔG +Q

$H_3CCHNH_3^+COO^-_{(aq)}$ + $O_{2aqua}$ +3 $H_2O$=> $H_3CC{=}OCOO^-_{(aq)}$ + 2 $NH_4OH$ + $H_3O^+$ +ΔG +Q

1. $\Delta H_r = 2\Delta H°_{H3CC=OCOO-} + 2\Delta H°_{NH4OH} + \Delta H°_{H3O} - 2\Delta H°_{alanine} - \Delta H°_{O2} - 3\ \Delta H°_{H2O}$ = -926,675 eksotermiska.....kJ/mol
...=2*-603,7+2*-361,2-689,93-285,81-(2*-554,8-11,715+3*-285,85).....
.....=-2905,54-1978,865=-926,675 eksotermiska.....kJ/mol

2. $\Delta S_{izkliede}$ = - $\Delta H_r$/ T = --926,675/310,15= 2987,828.....J/K/mol...

2. $\Delta S_r = 2\Delta S°_{H3CC=OCOO-} + 2\Delta S°_{NH4OH} + \Delta S°_{H3O} - 2\Delta S°_{alanine} - \Delta S°_{O2} - 3\ \Delta S°_{H2O}$ =792,21….....J/mol/K...
.....=2*-433,54+2*165,6-3,854-(2*-616,47+110,876-3*69,96)= -539,734+1331,944=792,21...J/mol/K

3. $\Delta S_{kopējā} = \Delta S_r + \Delta S_{izkliede}$ =792,21+2987,828 = 3780,04 J/mol/K.....J/mol/K

4. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = -926,675-310,15*0,79221= -1172,38.....kJ/mol **eksoerģiska**...
$T\bullet\Delta S_{kopējā}$ = 3780,04 J/K/mol•310,15 K= **1172,38**.....kJ/mol.....
saistītā TΔSn←izkliedētā enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ Q=927 kJ/mol **patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ = -1172 .....kJ/mol

$pK_{eq} = -\log(K_{eq}) = -\ln(10)*(-\Delta G_r/R/T) = -\ln(10)*(1172{,}38*1000/8{,}3144/310{,}15) = -\ln(10)*450{,}95 = -6{,}111136$.....

$K_{eq} = EXP(-\Delta G_r/R/T) = 10^{-pKeq} = 10^{6{,}11136} = 1{,}29*10^6$ temperatūra 310,15 K (37° C)

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

THERMODINAMIKA vingrinājums XXIV sukcināts $^{-}$**OO**C$CH_2CH_2$**C**OO$^{-}$ malāts $^{-}$**OO**CH**C**O**H**$CH_2$**C**OO$^{-}$

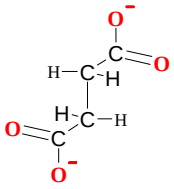
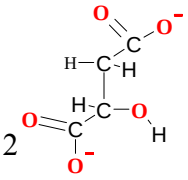
Fizioloģiskā vidē pH=7,36 T=310,15 K (37° C)

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standara apstakļos 310.15 K. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska**, **endotermiska**? Ssukcināts $^{-}$**OO**C$CH_2CH_2$**C**OO$^{-}$ par malatu $^{-}$**OO**CH**C**O**H**$CH_2$**C**OO$^{-}$ (37 C) 310.15 K, lietojot datu tabulu! Norādiet vai reakcija ir **eksoerģiska** vai **endoerģiska**! Izejviela sukcinats + $O_{2aqua}$ => produkts malāts, jonu spēks ir nulle **I**=0 .

| *Viela* | $\Delta H°$,$^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°$,$^{J}/_{mol/K}$ | $\Delta G_r$,$^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta H_r$,$^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S_r$,$^{J}/_{mol/K}$ | pK |
|---|---|---|---|---|---|---|
| H**OO**C$CH_2CH_2$**C**OO$^{-}_{(aq)}$ | - | - | 24.02 | 3.36 | -69.29 | pK2= |
| $^{-}$**OO**C$CH_2CH_2$**C**OO$^{-}_{(aq)}$ | -908,7 | -1,268 | 32.18 | 0.16 | -107.40 | pK1= |
| $^{-}$**OO**CH**C**O**H**$CH_2$**C**OO$^{-}_{(aq)}$ | -1079,8 | -1,3314 | 30.02 | 0.16 | -100.15 | pK1= |
| $O_{2aqua}$ | -11,715 | 110,876 | - | - | - | - |

1.$\Delta H_r=2\Delta H°_{-OOCHCOHCH2COO-}-2\Delta H°_{-OOCCH2CH2COO-}-_{\Delta}H°_{O2}$=.....$^{kJ}/_{mol}$....
=2*-1079,8-2*-908,7-(-11,715)= -2159,6+1829,115= -330,485 **eksotermiska**.....$^{kJ}/_{mol}$.....

2.$\Delta S_{izkliedēta}$= $-\Delta H_r/T$=330,485/310,15= 1065,565.....$^{J}/_{K/mol}$

sukcināts 2 + $O_{2aqua}$ => malāts 2 +$\Delta$G +**Q**

2 $^{-}$**OO**C$CH_2CH_2$**C**OO$^{-}_{(aq)}$ + $O_{2aqua}$ => 2 $^{-}$**OO**CH**C**O**H**$CH_2$**C**OO$^{-}_{(aq)}$ +$\Delta$G +**Q**

2. $\Delta S_r=2\Delta S°_{-OOCHCOHCH2COO-}-2\Delta S°_{-OOCCH2CH2COO-}-_{\Delta}S°_{O2}$ =.....$^{J}/_{mol/K}$....
.....=2*-1,3314-2*-1,268-110,876=-2,6628-108,34= -111,0.....$^{J}/_{mol/K}$....

3. $\Delta S_{kopējā}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$ =1065,565-111 = 954,565 ..... $^{J}/_{mol/K}$

4. $\Delta G_r = \Delta H_r - T*\Delta S_r$ = -330,485-310,15*0,111= -296,06.....**eksoerģiski**.$^{kJ}/_{mol}$.....

$T•\Delta S_{kopējā}$=954,565 $^{J}/_{K/mol}$•310,15 K= **296,06**.....$^{kJ}/_{mol}$.....

saistīta TΔSn← izkliedēta enerģija $\Delta G_{pretreakcija}$ Q=330,485 $^{kJ}/_{mol}$ **patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$ = -296 $^{kJ}/_{mol}$...

$pK_{eq}$=-log($K_{eq}$)=-ln(10)*(-$\Delta G_r$ /R/T)=-ln(10)*(296,06*1000/8,3144/310,15)= -ln(10)*79,9081= -4,38088.....

$K_{eq}$ =EXP(-$\Delta G_r$ /R/T)= $10^{-pKeq}=10^{4,38088}=2,4*10^4$ temperatūra 310,15 K (37° C)

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XXIV ksantīns $C_5H_4N_4O_2$ ureāts $C_5H_4N_4O_3^-{}_{(s)}$

Fizioloģiskā vidē pH=7,36 T=310,15 K (37° C)

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ standara apstakļos 310.15 K. Reakcija ir **eksotermiska** , **atermiska** vai **endotermiska**? Ksantīns $^-$ $C_5H_4N_4O_{2(s)}$ par ureātu $^-$ $C_5H_4N_4O_3^-{}_{(s)}$ (37 C) 310.15 K, lietojot datu tabulu! Norādiet vai reakcija ir **eksoerģiska** , **endoerģiska** vai **anerģiska** Izejviela ksantīns + $O_{2aqua}$ => produkti ureats jonu spēks **I**=0,25 .

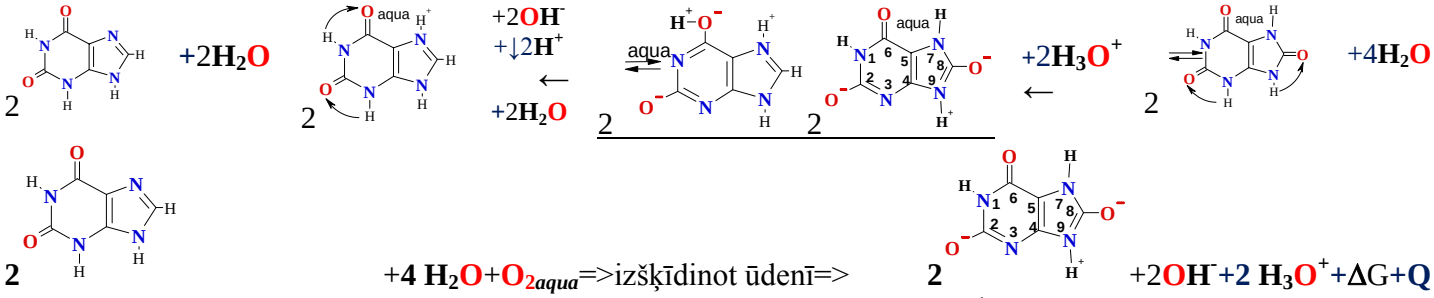
pK$_a$ Alberty, Robert A.Q 2006.

| CRC 2010 *viela* | $\Delta H°,^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta S°,^{J}/_{mol/K}$ | $\Delta G_r,^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta H_r,^{kJ}/_{mol}$ | $\Delta C_r,^{J}/_{mol/K}$ | pK | pKa |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| urīnskābe $C_5H_5N_4O_3^+{}_{(aq)}$ | - | - | -193,84 | 3.0 | -121 | pK2= | 4,207 |
| ureāts $C_5H_4N_4O_{3(aq)}$ | - | - | - | -0,5 | -217 | pK1= | 5,636 |
| ureāts $C_5H_3N_4O_3^-{}_{(s)}$ | -618,80 | 173,20 | -204,41 | - | - | pK0= | 11,3 |
| ksantīns $C_5H_5N_4O_2^+{}_{(aq)}$ | | | | 1,1 | -21 | pK2= | 1,92 |
| ksantīns $C_5H_4N_4O_{2(s)}$ | -379,60 | 161,10 | *-429,565* | -3,6 | -31 | pK1= | 6,27 |
| ksantīns $C_5H_3N_4O_2^-{}_{(aq)}$ | - | - | - | - | - | pK0= | 11,1 |
| $O_{2aqua}$ | -11,715 | 110,876 | 16,4 | - | - | - | - |
| $H_2O_{(aq)}$ | -285,85 | 69,96 | -237,191 | - | - | - | - |
| $H_3O^+{}_{(aq)}$ | -285,81 | -3,854 | -213,275 | - | - | - | - |

1.$\Delta H_r$=2$\Delta H°_{C5H3N4O3-}$+ **2**$\Delta H°_{H3O}$ - **2**$\Delta H°_{H2O}$ -2$\Delta H°_{C5H4N4O2}$-$\Delta H°_{O2}$=-466,605 **eksotermiska**.....$^{kJ}/_{mol}$...
...=2*-618,80+2*-285,81-(-11,715+2*-285,85-2*379,6)=-1809,22+1342,615= -466,605.....$^{kJ}/_{mol}$...

2.$\Delta S_{izkliedēta}$=-$\Delta H_r$/T=466,605/310,15=1504,449.....$^{J}/_{K/mol}$

Ksantīna protonēšana un jonizācija (disociācija)






**2** +**4** $H_2O$+$O_{2aqua}$=>izšķīdinot ūdenī=> **2** +2$OH^-$+**2** $H_3O^+$+$\Delta G$+**Q**

Izejvielas **2** $C_5H_4N_4O_{2(aqua)}$ +**2** $H_2O$ + $O_{2aqua}$ => **2** $C_5H_3N_4O_3^-{}_{(s)}$ +**2** $H_3O^+$+$\Delta G$ +**Q** produkti

ksantīns$_{aqua}$ ureāts$_{aqua}$

2. $\Delta S_r$=2$\Delta S°_{C5H3N4O3-}$+ **2**$\Delta S°_{H3O}$ - **2**$\Delta S°_{H2O}$ -2$\Delta S°_{C5H4N4O2}$-$\Delta S°_{O2}$=.....$^{J}/_{mol/K}$...
...=2*173,2+2*-3,854-110,876-2*69,96-2*161,1=338,692-572,996= -234,304.....$^{J}/_{mol/K}$...

3. $\Delta S_{kopējā}$= $\Delta S_r$+ $\Delta S_{izkliedēta}$ =1504,449-234,304= 1270,145.....$^{J}/_{mol/K}$...

4. $\Delta G_r$ = $\Delta H_r$ – T*$\Delta S_r$ = -466,605-310,15*-0,234304= -393,936.....**eksoerģiska**.$^{kJ}/_{mol}$...

T•$\Delta S_{kopējā}$=1270,145 $^{J}/_{K/mol}$•310,15 K= **393,94**.....$^{kJ}/_{mol}$.....

saistītā T$\Delta$Sn← izkliedēta enerģija Q=466,685 $^{kJ}/_{mol}$ **patvaļīga** $\Delta G_{reakcija}$= -393,936 $^{kJ}/_{mol}$...

$pK_{eq}$=-log($K_{eq}$)=-ln(10)*(-$\Delta G_r$ /R/T)=-ln(10)*(466,605*1000/8,3144/310,15)= -ln(10)*180,945= -5,19819.....
$K_{eq}$ =EXP(-$\Delta G_r$ /R/T)= $10^{-pKeq}$=$10^{5,19819}$=1,58*$10^5$ temperature 310,15 K (37° C)

5.$\Delta G_r$=2$\Delta G°_{C5H3N4O3-}$+**2**$\Delta G°_{H3O}$-**2**$\Delta G°_{H2O}$-2$\Delta G°_{C5H4N4O2}$-$\Delta G°_{O2}$=-846,205 **eksotermiska**.....$^{kJ}/_{mol}$....
=2*-204,41+2*-213,275-(16,4+2*-237,191-2*-429,565)=-835,37-401,148= -1236,52.....$^{kJ}/_{mol}$...


1.Alberty,Robert A.Q 2006©,p463,John Wiley & Sons, Biochemical Thermodynamics Applications of Mathematica
2. David R. Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 2010, ©, p.2760

http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CO2O2Thermodynamic15.pdf

TERMODINAMIKA VINGRINĀJUMS XXV Osmo molārs koncentrācijas gradients 11= $C_{osm}$ zaļajos augos

Aprēķināt $\Delta H_r$, $\Delta S_r$, $\Delta G_r$ un siltuma daudzumu **eksotermiska**, **atermiska** vai **endotermiska** reakcija standarta apstākļos 298.15 K. (**PRC**) foto sintētiskajā reakcijas centrā zaļo augu enzīmu kompleksa produkti glikoze $\mathbf{C_6H_{12}O_6}$ un skābeklis $6O_{2aqua}$ ar +fotonu **E=h•v** absorbciju akvaporīnu substrāti skābeklis $\mathbf{6O_2}$ un ūdens $\mathbf{6H_2O}$ palielina **osmotisko** spiedienu uz šūnu ārpusi 11 reizes, jo samazinās **osmo** molārā koncentrācija šūnā no sākuma reizes 12=$C_{osm}$=6+6 līdz vienai glikozes $\mathbf{C_6H_{12}O_6}$ molekulai $C_{osm}$=1.

$$\mathbf{6HCO_3^-+6H_3O^++Q \xrightarrow{PRC+h\nu} C_6H_{12}O_6+6O_{2aqua}+6H_2O}$$

Tā pēc plūsma uz āru cauri akvaporīniem palielinās 11 reizes. Skābeklis $\mathbf{6O_2}$ un ūdens $\mathbf{6H_2O}$ izspiežas ārā no šūnas pretēji koncentrācijas gradientam 1/12 cauri akvaporīniem :

$$\mathbf{6H_2O+6O_{2aqua} \xrightarrow{Akvaporīniem} 6O_{2aqua}+6H_2O}$$

atermiskā $\Delta H_{kanāls}$= 0 $^{kJ}/_{mol}$ veidā bez siltuma zudumiem, lietojot **PRC** foto sintētiskā reakcijas centra enerģiju $\Delta G_{PCR}$=3040,1 $^{kJ}/_{mol}$ (vingrinājums III ):lp p.3:http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/BioChemicalPproces.pdf

Bikarbonāts + ūdeņraža jons + siltuma pievadīšana $\mathbf{6HCO_3^-+6H_3O^+ + Q + \Delta G_{reakcija}}$ —(fotons E=hν, PRC; sarkans zils fotosintēze)→ glikoze + **skābeklis** + ūdens $\mathbf{C_6H_{12}O_6+ 6\ O_2+6H_2O}$

pretreakcija

Miniet vai reakcija ir **eksoerģiska** vai **endoerģiska**! Universālā gāzu konstante R=8,3144 J/mol/K.

**Eksoerģiska** $\Delta G_{kanāls}$=**-RTln**($C_{osm}[\mathbf{O_{2aqua}+H_2O}]_{labā}/C_{osm}[\mathbf{O_{2aqua}+H_2O}]_{kreisā}$)=-12**RTln**(12/1)= -36.96 $^{kJ}/_{mol}$.....

| *Viela* | izejviela | produkts |
|---|---|---|
| $\mathbf{O_{2aqua}}$ | $[O_2] = 6•10^{-5}$ M | $[O_2] = 6•10^{-5}$ M |
| $\mathbf{H_2O}$ | 55,3 M | 55,3 M |

$\Delta G_{O_2}$=**-RTln**($[O_2]_{palabi}/[O_2]_{pa\_kreisi}$)= **-RTln**($K_{līdzsvara}$)= -6. 1599.$^{kJ}/_{mol}$ ...

.....= -8,3144*298,15***ln**(12/1)= -8,3144*298,15*-2.4849= -6.1599.$^{kJ}/_{mol}$.....

$\mathbf{6O_{2aqua}}$ molekulām $\Delta G_{6O_2}$= -6.1599*6= -36.9596 ..... $^{kJ}/_{mol}$

$\Delta G_{6\mathbf{H_2O}}$=-6**RTln**($[\mathbf{H_2O}]_{pa\_labi}/[\mathbf{H_2O}]_{pa\_kreisi}$)=6*8,3144*310,15***ln**(1/12)= -36.9596..... $^{kJ}/_{mol}$

.....**eksoerģiska**.....

.....

.....

$\Delta S_{6O_2}$=-6**Rln**($[O_2]_{palabi}/[O_2]_{pa\_kreisi}$)= -8,3144***ln**(1/12)=20,66*6=123.96..... $^{J}/_{mol/K}$...

$\Delta S_{6\mathbf{H_2O}}$=-6**Rln**($[\mathbf{H_2O}]_{palabi}/[\mathbf{H_2O}]_{pa\_kreisi}$)= -8,3144***ln**(1/12)=123.96..... $^{J}/_{mol/K}$...

.....

.....

.....

$\Delta H_{kanāls}$=.0..... $^{kJ}/_{mol}$..... bez siltuma zudumiem .....

.....

T•$\Delta S_{6O_2}$= -0, 12396•298,15=**36.9596**.....kJ/mol saistīta **PRC** TΔSn izlietotā enerģija TΔSn=3040,1 $^{kJ}/_{mol}$ izplūst $\mathbf{O_2}$

T•$\Delta S_{6\mathbf{H_2O}}$ = -0,12396•298,15=**36.9596**.....kJ/mol saistīta **PRC** TΔSn izlietotā enerģija TΔSn=3040,1 $^{kJ}/_{mol}$ izplūst $\mathbf{H_2O}$

.....

.....

.....

Molekulām $\mathbf{6O_{2aqua}+6H_2O}$ T•$\Delta S_{6\mathbf{H_2O}+6O_2}$=**36.9596+36.9596=73.919**.....kJ/mol saistīta **PRC** TΔSn=3040,1 $^{kJ}/_{mol}$

**atermiska** $\Delta H°_{reakcija}$ =+0 kJ/mol; Q= -0 kJ/mol.....**patvaļīga** $\Delta G°_{reakcija}$ = **-73.919** kJ/mol.....

**Fotosintēze** ar producētu no bikarbonāta un ūdeņraža joniem $\mathbf{6HCO_3^-+6H_3O^+}$ skābekli un ūdeni $\mathbf{6O_{2aqua}+6H_2O}$ atšķaida osmolāro koncentrāciju. Skābekļa un ūdens plūsma ārā no **PRC** šūnas cauri membrānu akvaporīniem pretēji koncentrācijas gradientam 12/1 virza standarta brīvā enerģija $\Delta G_{6\mathbf{H_2O}+6O_2}$= **-73.919** kJ/mol uz vienu glikozes $\mathbf{C_6H_{12}O_6}$ molu!