

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

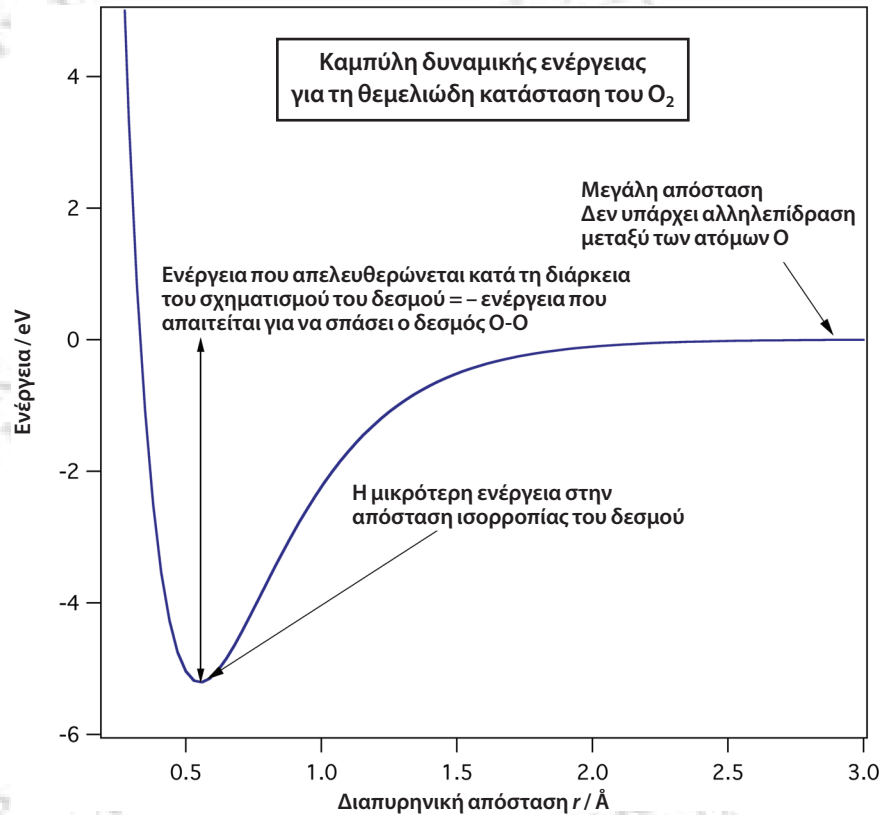
Εισαγωγή

Μεγάλο μέρος της χημείας έχει ως κίνητρο το ερώτημα “πώς”. Πώς μπορώ να φτιάξω μία πρωταρχική αλκοόλη; Αντιδρώντας ένα αντιδραστήριο Grignard με φορμαλδεΐδη. Πώς κάνω ένα διάλυμα που περιέχει φαινολοφθαλεΐνη να αλλάξει από άχρωμο σε ροζ; Προσθέτοντας βάση. Πώς μπορώ να φτιάξω στερεό θειϊκό βάριο; Προσθέτοντας αρκετό χλωριούχο βάριο διαλυμένο σε νερό σε ένα διάλυμα θειϊκού νατρίου, το θειϊκό βάριο κατακάθεται. Η φυσικοχημεία υποκινείται από το ερώτημα “γιατί”. Το αντιδραστήριο Grignard και η φορμαλδεΐδη ακολουθούν έναν μοριακό χορό γνωστό ως μηχανισμό αντίδρασης, στον οποίο ισχυροί δεσμοί δημιουργούνται σε βάρος ασθενέστερων δεσμών. Σε όξινα διαλύματα, η πρωτονιακή μορφή της φαινολοφθαλεΐνης απορροφά φως στην περιοχή της υπεριώδους ακτινοβολίας αλλά είναι διαφανής στην ορατή περιοχή. Όταν προσθέσουμε βάση, η φαινολοφθαλεΐνη μετατρέπεται σε αποπρωτονιακή μορφή, η οποία απορροφά στο πράσινο του ορατού φάσματος, με μέγιστο στα 553 nm. Η απορρόφηση του φωτός συμβαίνει όταν ένα ηλεκτρόνιο προωθείται από την βασική κατάσταση σε μια διεγερμένη κατάσταση. Το BaCl_2 και το Na_2SO_4 είναι και τα δύο πολύ διαλυτά στο νερό. Το BaSO_4 είναι λιγότερο διαλυτό στο νερό. Όταν αρκετό Ba^{2+} και SO_4^{2-} είναι παρόντα στο νερό, είναι ενεργητικά πιο ευνοϊκό για αυτά να σχηματίσουν μια στερεή ένωση, η οποία είναι πυκνότερη από το νερό και επομένως κατακάθεται στον πυθμένα του ποτηριού. Αν σας ενδιαφέρει το “γιατί” και όχι το “πώς”, τότε χρειάζεται να καταλάβετε τη φυσικοχημεία.

Η εισαγωγική χημεία - γενική χημεία και εισαγωγή στη σύνθεση - εισήγαγε όλες τις μείζονες, σαρωτικές, σημαντικές πτυχές της χημείας. Στις περισσότερες περιπτώσεις σας παρουσιάστηκαν αυτές οι ιδέες χωρίς θεμέλια, δηλαδή σας έλεγαν ότι συμβαίνουν ορισμένα φαινόμενα - όπως ο χημικός δεσμός ή οι μετατροπές φάσεων - αλλά σας δόθηκαν μόνο νύξεις για το γιατί συμβαίνουν αυτά τα φαινόμενα. Έχετε εισαχθεί σε ειδικές περιπτώσεις και σε αποτελέσματα σε συγκεκριμένη θερμοκρασία. Όμως, δεν σας έχουν δοθεί τα μέσα, το οπλοστάσιο, για να απομακρυνθείτε από τις ιδανικές περιπτώσεις ή για να αλλάξετε παραμέτρους έτσι ώστε να προβλέψετε τι θα γίνει σε επόμενο στάδιο. Ας θυμηθούμε μερικές έννοιες κλειδιά (και ίσως προσθέσουμε κάποιες λεπτομέρειες που εύχομαι να είχατε διδαχθεί). Αυτό θα διαφωτίσει το πού πρέπει να πάμε και θα δώσει κίνητρο στη συζήτηση για μεγάλο μέρος της κατασκευής του οπλοστασίου μας. Επίσης, θα δώσει έμφαση σε περιοχές στις οποίες οι απλοποιήσεις της εισαγωγικής χημείας μερικές φορές τείνουν να μοιάζουν με κατασκευή μύθων. Ο ρόλος της φυσικοχημείας είναι να σπάσει τις οφθαλμαπάτες της απλοϊκής εξήγησης ώστε να κατασκευαστεί το οπλοστάσιο που οδηγεί σε θεμελιώδη κατανόηση. Σε μεγάλο βαθμό, η φυσικοχημεία είναι η μελέτη και η κατανόηση των k , K , n , ψ (σταθερά ρυθμού, σταθερά ισορροπίας, γραμμομόρια, κυματοσυνάρτηση) και πως αυτά ανταποκρίνονται στα t , T , p (χρόνος, θερμοκρασία, πίεση). Δηλαδή, θέλουμε να καταλάβουμε τη χρονική εξέλιξη και την απόκριση των χημικών συστημάτων στις πειραματικές συνθήκες. Στην πορεία θα διαπιστώσουμε πως ίσως οι τρεις πιο σημαντικές σταθερές των οποίων τις επιπτώσεις πρέπει να καταλάβουμε είναι οι k_B , h και NA (σταθερά Boltzmann, σταθερά Planck, αριθμός Avogadro) και πως αυτές σχετίζονται με την ενέργεια, την τάση για αλλαγή και την ικανότητα μας να εξετάζουμε συστήματα σε ατομικό επίπεδο.

1.1 Άτομα και Μόρια

Το χημικό μας σύμπαν αποτελείται από άτομα και μόρια. Για τους σκοπούς αυτού του μαθήματος πρόκειται να περιοριστούμε στα ηλεκτρόνια, στα πρωτόνια και στα νετρόνια και δεν θα μας απασχολήσει η εσωτερική δομή αυτών των σωματιδίων. Τα άτομα αποτελούνται από τον πυρήνα, στον οποίο βρίσκονται τα πρωτόνια και τα νετρόνια, ενώ τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τον χώρο έξω από τον πυρήνα. Ο χώρος που καταλαμβάνουν τα ηλεκτρόνια ονομάζεται τροχιακό. Τα τροχιακά έχουν συγκεκριμένα σχήματα. Τα s τροχιακά είναι σφαιρικά, ενώ τα p τροχιακά έχουν σχήμα διπλού λοβού (όπως συνήθως παρουσιάζονται στη χημεία). Τα d και f τροχιακά είναι πιο περί-



Εικόνα 1.1 Διάγραμμα δυναμικής ενέργειας για τη θεμελιώδη ηλεκτρονιακή κατάσταση του μορίου O_2 .

πλοκα. Τα άτομα είναι ουδέτερα, δηλαδή ο αριθμός των αρνητικά φορτισμένων ηλεκτρονίων ακριβώς εξισορροπεί τον αριθμό των θετικά φορτισμένων πρωτονίων. Τα νετρόνια δεν έχουν φορτίο. Ένα άτομο μπορεί να διεγερθεί, για παράδειγμα, με την απορρόφηση φωτός. Αν τα φωτόνια είναι αρκούντως ενεργητικά, ένα ηλεκτρόνιο μπορεί να απομακρυνθεί από το άτομο και να σχηματιστεί ένα θετικό ιόν. Τα αρνητικά ιόντα σχηματίζονται όταν ένα άτομο αιχμαλωτίσει ένα επιπλέον ηλεκτρόνιο από μια εξωτερική πηγή.

Ορισμένα άτομα θα σχηματίσουν μόρια όταν αλληλεπιδράσουν το ένα με το άλλο. Τα μόρια έχουν καλώς ορισμένη στοιχειομετρία (αναλογία των ατόμων που συνδυάζονται) και καλώς ορισμένη γεωμετρία με χαρακτηριστικές αποστάσεις δεσμών και γωνίες δεσμών. Καθώς τα μόρια γίνονται όλο και μεγαλύτερα είναι ικανά να λάβουν αρκετές διαφορετικές διαμορφώσεις (ισομερή).

Ένα μόριο συγκρατείται με χημικούς δεσμούς. Μια ιδιαίτερα άσχημη παρανόηση που έχουν πολλοί είναι ότι ενέργεια απελευθερώνεται όταν σπάει ένας χημικός δεσμός. Όπως φαίνεται στην Εικόνα 1.1, *ενέργεια απελευθερώνεται όταν σχηματίζεται ένας χημικός δεσμός*. Ο σχηματισμός χημικού δεσμού μεταξύ δύο ατόμων πρέπει να είναι *εξώθερμη* διεργασία, αλλιώς δεν θα συμβεί ποτέ. Αντιστρόφως *απαιτείται ενέργεια ώστε να σπάσει ένας χημικός δεσμός* και αυτή η διεργασία είναι *ενδόθερμη*. Οι χημικοί δεσμοί στα μόρια διακρίνονται κυρίως σε δύο κατηγορίες. Σε έναν ομοιοπολικό δεσμό, τα ηλεκτρόνια διαμοιράζονται μεταξύ των ατόμων. Εάν τα ηλεκτρόνια διαμοιράζονται εξίσου μεταξύ των ατόμων, σχηματίζεται ένας μη πολικός δεσμός, αλλά εάν διαμοιράζονται με άνισο τρόπο, σχηματίζεται ένας πολικός δεσμός. Εκτός κι αν η γεωμετρία των μορίων έχει κάποια ειδική συμμετρία που κάνει τις κατανομές των φορτίων να αλληλοακυρωθούν, οι πολικοί δεσμοί οδηγούν σε πολικά μόρια, δηλαδή σε μόρια που παρουσιάζουν διπολική ροπή. Στους ιοντικούς δεσμούς, ηλεκτροστατικές δυνάμεις συγκρατούν τα θετικά και αρνητικά φορτία των ιόντων που σχηματίζονται από τη μεταφορά ενός τουλάχιστον ολοκλήρου ηλεκτρονίου.

Οι κινήσεις των υποατομικών σωματιδίων κυβερνώνται από τη κβαντική μηχανική και όχι από την κλασική μηχανική. Η κλασική μηχανική περιγράφει καθημερινά σωματίδια: μπάλες μπιλιάρδου και μήλα που πέφτουν στα κεφάλια νυσταγμένων φυσικών φιλοσόφων. Η κβαντική μηχανική είναι διαφορετική. Οι ενεργειακές καταστάσεις κυβερνώνται από τη κβαντική μηχανική. Τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν ατομικά τροχιακά στα άτομα και μοριακά

τροχιακά στα μόρια. Επειδή ο ομοιοπολικός δεσμός οφείλεται στο διαμοιρασμό των ηλεκτρονίων μεταξύ των ατόμων, ο δεσμός αυτός είναι εκ φύσεως κβαντομηχανικός.

1.2 Φάσεις

Πηγαίνοντας από ένα μόριο ή άτομο σε μια συλλογή σωματιδίων, οι επιδράσεις των διαμοριακών δυνάμεων γίνονται σημαντικές. Υπάρχουν αρκετοί διαφορετικοί τύποι διαμοριακών αλληλεπιδράσεων: οι διπόλου-διπόλου, οι van der Waals κι ο δεσμός υδρογόνου είναι κάποιες από τις συνηθέστερες. Οι τρεις πιο συχνά συναντούμενες φάσεις στη χημεία είναι τα αέρια, τα υγρά και τα στερεά. Σε αυτό το μάθημα δεν θα ανησυχήσουμε για τις άλλες δύο φάσεις: το πλάσμα και το συμπύκνωμα Bose–Einstein, οι οποίες είναι πιθανότερο να συναντηθούν σε πολύ υψηλές ή σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες, αντιστοίχως.

Είσαστε ήδη εξοικειωμένοι με την έννοια του ιδανικού αερίου και την καταστατική του εξίσωση

$$pV = nRT \quad (1.1)$$

Οι διαμοριακές αλληλεπιδράσεις απουσιάζουν σε ένα ιδανικό αέριο. Ακόμη και σε ένα πραγματικό αέριο, οι διαμοριακές αλληλεπιδράσεις είναι αδύναμες εφόσον η πίεση και η θερμοκρασία απέχουν πολύ από τις συνθήκες που προκαλούν συμπύκνωση. Τα μόρια σε αέρια φάση είναι ελεύθερα να μετατοπίζονται, να περιστρέφονται και να ταλαντώνονται. Υπάρχουν επίσης ηλεκτρονικές διεγέρσεις, αλλά συνήθως αυτές δεν είναι προσιτές με θερμικές διεγέρσεις. Οι θέσεις όπου μπορούμε να βάλουμε ενέργεια (μετατοπίσεις, περιστροφές, ταλαντώσεις και ηλεκτρονικές καταστάσεις) ονομάζονται *βαθμοί ελευθερίας*.

1.2.1 Κατευθυνόμενη Εξάσκηση

Σε αυτό το βιβλίο θα βρείτε κατευθυνόμενη εξάσκηση, δηλαδή σύντομες ασκήσεις έτσι ώστε ο αναγνώστης - η αναγνώστρια να συλλέγει τις σκέψεις του - της και να ενισχύει τις έννοιες. Υπολογίστε τον όγκο σε m^3 ενός γραμμομορίου ιδανικού αερίου σε κανονικές συνθήκες (Κ.Σ.) θερμοκρασίας και πίεσης. Οι Κ.Σ. (STP, standard temperature and pressure) ορίζονται ως $T = 273.15 \text{ K}$ και $p = 101325 \text{ Pa} = 1 \text{ atm}$, ενώ η τυπική θερμοκρασία περιβάλλοντος ($T = 298.15 \text{ K}$) και η ατμοσφαιρική πίεση ($p = 101325 \text{ Pa} = 1 \text{ atm}$) δηλώνονται ως *συνθήκες περιβάλλοντος* (SATP, standard ambient temperature and pressure).

[Απαντήσεις: 0.0227 m^3 , 0.0245 m^3]

Καθώς η θερμοκρασία μειώνεται ή η πίεση αυξάνεται, τα σωματίδια ενός αερίου πλησιάζουν μεταξύ τους και τελικά οι διαμοριακές αλληλεπιδράσεις οδηγούν σε συμπύκνωση. Συνήθως, ένα αέριο συμπυκνώνεται σε ένα υγρό. Οι διαμοριακές αλληλεπιδράσεις είναι πολύ πιο σημαντικές στα υγρά παρά στα αέρια, επειδή τα μόρια είναι πολύ πιο κοντά μεταξύ τους. Το ότι τα μόρια είναι πολύ πιο κοντά μεταξύ τους σημαίνει ότι η πυκνότητα τους είναι πολύ υψηλότερη και ότι συγκρούονται μεταξύ τους πολύ συχνότερα από τα μόρια ενός αερίου. Τα μόρια ενός υγρού είναι ακόμα ελεύθερα να μετατοπίζονται, να περιστρέφονται και να ταλαντώνονται, αλλά τα φάσματα που σχετίζονται με αυτούς τους βαθμούς ελευθερίας φαίνονται να είναι διαφορετικά από αυτά της αέριας φάσης. Τα υγρά συνήθως ταξινομούνται σύμφωνα με το αν είναι πολικά ή μη πολικά. Τα όμοια τείνουν να διαλύουν τα όμοια, έτσι οι πολικοί διαλύτες μπορούν να διαλύουν ιοντικές ενώσεις (ηλεκτρολύτες) στα συστατικά τους ιόντα. Οι μη ηλεκτρολύτες διαλύονται χωρίς το σχηματισμό ιόντων. Τα ηλεκτρολυτικά διαλύματα μπορούν να άγουν ηλεκτρικά ρεύματα.

Σε ακόμη χαμηλότερη θερμοκρασία και υψηλότερη πίεση, τα υγρά συμπυκνώνονται σε στερεά. Τα στερεά είναι συνήθως πυκνότερα από τα υγρά, αλλά η διαφορά κατά αυτήν την αλλαγή φάσης δεν είναι τόσο μεγάλη όσο από την αέρια στη συμπυκνωμένη φάση. Τα άτομα και τα μόρια σε ένα στερεό δεν μπορούν πλέον να μετατοπίζονται και να περιστρέφονται ελεύθερα. Υπάρχουν ακόμα ταλαντώσεις και ηλεκτρονικές διεγέρσεις. Τα στερεά ταξινομούνται συχνά βάσει της ηλεκτρονικής δομής τους σύμφωνα με τις ιδιότητες της ηλεκτρικής τους αγωγιμότητας: τα μέταλλα συμπεριφέρονται ως καλοί αγωγοί αφού δεν υπάρχει χάσμα μεταξύ των ζωνών σθένους και αγωγιμότητας, ενώ οι μονωτές συμπεριφέρονται ως κακοί αγωγοί αφού χαρακτηρίζονται από μεγάλο ενεργειακό χάσμα. Οι ημιαγωγοί βρίσκονται κάπου ανάμεσα τους.

1.3 Ενέργεια

Όταν αποθηκεύεται ενέργεια σε ένα σύστημα, κατανέμεται μεταξύ των διαθεσίμων βαθμών ελευθερίας. Θα πρέπει να υπενθυμίσουμε τη βασική εξίσωση της θερμομετρίας, η οποία δηλώνει ότι το ποσό της θερμότητας q που απαιτείται για την αύξηση της θερμοκρασίας κατά ΔT , n γραμμομορίων μιας ουσίας, σχετίζεται με τη θερμοχωρητικότητα C_m (ο δείκτης m δηλώνει γραμμομοριακή (molar) ποσότητα) ως

$$q = nC_m \Delta T. \quad (1.2)$$

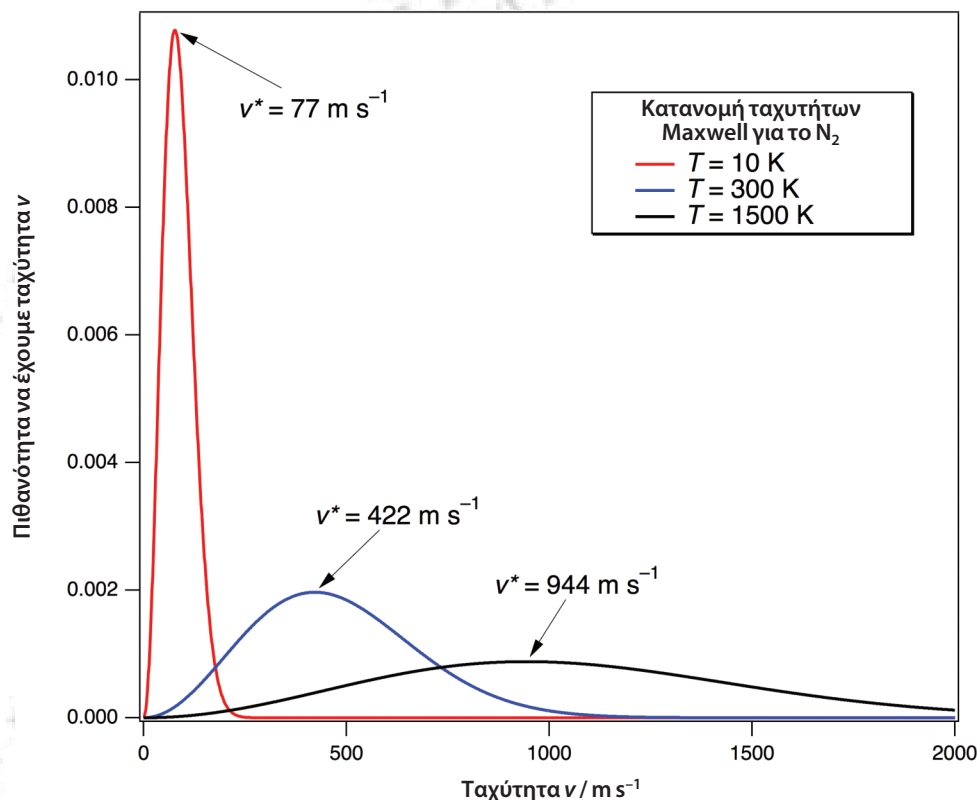
Ίσως να θυμόσαστε ότι η C_m εξαρτάται από το εάν η διεργασία συμβαίνει υπό σταθερό όγκο ή υπό σταθερή πίεση. Έτσι, θα αναφερόμαστε σε αυτήν ως $C_{p,m}$ ή $C_{v,m}$. Πιθανόν να μην εκτιμάτε τη σημαντικότητα της θερμοχωρητικότητας στις μοριακές και χημικές ιδιότητες. Θα μάθουμε περισσότερα για αυτήν, θα μάθουμε πώς αυτή σχετίζεται με τη μοριακή και φασική δομή, και ότι εξαιτίας αυτού η θερμοχωρητικότητα εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Επειδή η C_m εξαρτάται τόσο από τη θερμοκρασία όσο και από τη φάση, θα δούμε ότι η Εξ. (1.2) είναι μια προσέγγιση και θα πρέπει να μάθουμε πώς να αντιμετωπίζουμε παραμέτρους που δεν είναι γενικά σταθερές. Εδώ γίνεται απαραίτητος ο μαθηματικός λογισμός.

1.3.1 Κατευθυνόμενη Εξάσκηση

Υπολογίστε τη θερμότητα που απαιτείται για να αυξηθεί η θερμοκρασία 10.0 g νερού, αν αρχικώς βρισκόταν στους 298 K, κατά 1 °C. Η θερμοχωρητικότητα του νερού είναι $75.3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

[Απάντηση: 41.8 J]

Η ισορροπία ενός δείγματος αερίου σε μια συγκεκριμένη θερμοκρασία οδηγεί σε κατανομή της ενέργειας σε μεταφορικούς, περιστροφικούς και δονητικούς βαθμούς ελευθερίας. Εκτός κι αν περιορίσουμε τα μόρια μας σε πολύ μικρά κιβώτια, η κατανομή της ενέργειας στον μεταφορικό βαθμό ελευθερίας περιγράφεται από μια συνεχή κατανομή γνωστή ως κατανομή ταχυτήτων Maxwell. Η κατανομή Maxwell μοιάζει με την Εικόνα 1.2.



Εικόνα 1.2 Κατανομή ταχυτήτων Maxwell των μορίων αερίου N₂ σε τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες.

Οι περιστροφικοί και οι δονητικοί βαθμοί ελευθερίας είναι εκ φύσεως κβαντομηχανικοί. Τα ενεργειακά επίπεδα που συνδέονται με αυτούς τους βαθμούς ελευθερίας δεν είναι συνεχή, αλλά είναι κβαντισμένα, δηλαδή διακριτά. Η ενέργεια κατανέμεται σε αυτούς τους βαθμούς ελευθερίας μεταβάλλοντας τους πληθυσμούς αυτών των επιπέδων, δηλαδή μεταβάλλοντας τον αριθμό των μορίων σε κάθε ένα από τα ενεργειακά επίπεδα. Αυτή η κατανομή του πληθυσμού ακολουθεί την κατανομή Boltzmann, για την οποία πρέπει να μάθουμε περισσότερα.

Οι ηλεκτρονικές καταστάσεις είναι επίσης κβαντισμένες. Οι μεταβάσεις μεταξύ των διαφορετικών επιπέδων ενέργειας είναι υπεύθυνες για τις γραμμές και τις ζώνες που παρατηρούνται στην περιστροφική, δονητική και ηλεκτρονική φασματοσκοπία. Ο πυρηνικός μαγνητικός συντονισμός περιλαμβάνει spin flips (μεταπτώσεις ιδιοστροφικής).

1.4 Χημικές αντιδράσεις

Όταν άτομα και μόρια αναμειγνύονται, μπορούν να αντιδράσουν σχηματίζοντας προϊόντα. Κάποιες αντιδράσεις είναι αυθόρμητες και συμβαίνουν κατά τη μίξη, αλλά κάποιες αντιδράσεις συμβαίνουν μόνο αν τους δοθεί κάποια ώθηση. Η χημεία περιλαμβάνει αλλαγές στο πώς διαμοιράζονται τα ηλεκτρόνια. Δεσμοί μπορούν να σχηματιστούν ή να σπάσουν κατά τις αντιδράσεις. Η χημική αντιδραστικότητα μπορεί να ταξινομηθεί σύμφωνα με τον τρόπο με τον οποίο διεξάγονται οι αντιδράσεις. Η χημεία χαρακτηρίζεται ως θερμική χημεία όταν ο έλεγχος της θερμοκρασίας χρησιμοποιείται για τη ρύθμιση της αντιδραστικότητας και του ρυθμού αντίδρασης. Με άλλα λόγια, η ενέργεια, η οποία είναι τυχαία κατανομημένη μεταξύ των βαθμών ελευθερίας του συστήματος, αρκεί να προκαλέσει αλλαγή του διαμοιρασμού των ηλεκτρονίων. Αυτό είναι τόσο κοινό που συνήθως ονομάζεται "χημεία". Η ηλεκτροχημεία περιλαμβάνει την ανταλλαγή ελεύθερου φορτίου (ηλεκτρόνια και μερικές φορές πρωτόνια). Ανταποκρίνεται στη θερμοκρασία, αλλά, είναι επίσης σημαντικό πώς μπορεί να ανταποκριθεί και σε διαφορά δυναμικού εφαρμοζόμενη σε ηλεκτρόδια, τα οποία έρχονται σε επαφή με τα αντιδρώντα. Η χημεία χαρακτηρίζεται ως εξαναγκασμένη (κατευθυνόμενη) χημεία όταν προκαλείται από διεγέρσεις, οι οποίες οφείλονται σε απορρόφηση φωτονίων, σκέδαση ηλεκτρονίων ή ιόντων. Η πιο κοινή της μορφή είναι η φωτοχημεία, στην οποία ηλεκτρονικές διεγέρσεις, προκαλούμενες από αλληλεπιδράσεις φωτονίων / ύλης, έχουν ως αποτέλεσμα τον σχηματισμό προϊόντων.

Τα αντιδρώντα συχνά διαχωρίζονται από τα προϊόντα από ένα φράγμα ενεργοποίησης. Το ύψος αυτού του φράγματος - η ενέργεια ενεργοποίησης - πρέπει να ξεπεραστεί κατά τη διάρκεια της αντίδρασης. Υψηλότερες θερμοκρασίες οδηγούν στην παρουσία περισσότερων σωματιδίων υψηλής ενέργειας στην κατανομή Maxwell-Boltzmann (δηλαδή, η ουρά της κατανομής σε υψηλές ταχύτητες, η οποία φαίνεται στην Εικόνα 1.2, γίνεται μεγαλύτερη). Γι' αυτό συνήθως βλέπουμε τους ρυθμούς της αντίδρασης να αυξάνονται με την αύξηση της θερμοκρασίας. Οι ρυθμοί των αντιδράσεων επίσης εξαρτώνται από τις συγκεντρώσεις των αντιδρώντων, επειδή τα αντιδρώντα συνήθως πρέπει να συγκρουστούν για να αντιδράσουν. Ο ρυθμός της σύγκρουσης αυξάνεται όταν η πυκνότητα των αντιδρώντων είναι υψηλότερη. Η παρουσία ενός καταλύτη μπορεί επίσης να επιταχύνει μια αντίδραση. Οι καταλύτες χαμηλώνουν τις ενέργειες ενεργοποίησης αλλά δεν καταναλώνονται οι ίδιοι στις αντιδράσεις.

Οι χημικές αντιδράσεις συμβαίνουν επειδή τα συστήματα προσπαθούν να ελαχιστοποιήσουν την ενέργεια Gibbs. Η ενέργεια Gibbs, G , περιέχει συνεισφορές από την ενθαλπία H και την εντροπία S . Η ενθαλπία αφορά την ενέργεια των αλληλεπιδράσεων (όπως των δεσμών), ενώ η εντροπία αφορά την τυχαία κατανομή της ενέργειας μεταξύ των βαθμών ελευθερίας και την αταξία. Ένα σύστημα θα εξελιχθεί όσο η ενέργεια Gibbs δεν έχει φθάσει στο ελάχιστο. Με άλλα λόγια, στην ισορροπία, $\Delta G = 0$. Στην ισορροπία, η ενέργεια Gibbs δεν αλλάζει πλέον. Η αλλαγή της ενέργειας Gibbs σχετίζεται με την αλλαγή της ενθαλπίας ΔH , την απόλυτη θερμοκρασία T και τη μεταβολή της εντροπίας ΔS

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S. \quad (1.3)$$

Στην ισορροπία, οι ρυθμοί της ευθείας και της αντίστροφης αντίδρασης είναι ίδιοι και οι συγκεντρώσεις των ειδών των σωματιδίων σταθερές. Η σταθερά ισορροπίας K σχετίζει αυτές τις συγκεντρώσεις μεταξύ τους. Για μια αμφίδρομη αντίδραση



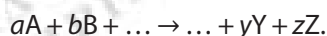
έχουμε

$$K = \frac{[C][D]}{[A][B]} \quad (1.5)$$

Η μη ιδανική συμπεριφορά εκδηλώνεται τόσο στις εξισώσεις ρυθμού όσο και σε υπολογισμούς ισορροπίας. Αντιμετωπίζουμε αυτές τις αποκλίσεις από την ιδανική συμπεριφορά εισάγοντας τη δραστηριότητα αντί των συγκεντρώσεων.

Είναι σημαντικό να καταλάβουμε εάν ένα σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση ισορροπίας ή μη ισορροπίας. Η κατάσταση μη ισορροπίας μπορεί να χαρακτηριστεί κατάσταση ροής, σταθερή κατάσταση ή μετασταθής κατάσταση. Η ισορροπία καθορίζεται από όρια που θέτει η θερμοδυναμική. Οι καταστάσεις μη ισορροπίας καθορίζονται από την κινητική της αντίδρασης. Με άλλα λόγια, η θερμοδυναμική κάνει κάποιες προβλέψεις για το τι επιτρέπεται και τι απαγορεύεται. Ενώ ό,τι απαγορεύεται από τη θερμοδυναμική, απαγορεύεται, αυτό που επιτρέπεται από τη θερμοδυναμική είναι μόνο ένα όριο, το οποίο δεν μπορεί να ξεπεραστεί. Το όριο αυτό πιθανόν να μην μπορεί να προσεγγιστεί αν η κινητική της αντίδρασης δεν επιτρέπει το σύστημα να εξελιχθεί προς την κατάσταση ισορροπίας.

Μια ισορροπημένη στοιχειομετρική χημική αντίδραση γράφεται με στοιχειομετρικούς συντελεστές a , b και z και ούτω καθ' εξής, οι οποίοι είναι όλοι θετικοί αριθμοί



Η IUPAC ορίζει τους στοιχειομετρικούς αριθμούς ν_A , ν_B και ούτω καθ' εξής, ως προσημασμένες ποσότητες, οι οποίες είναι αρνητικές για τα αντιδρώντα και θετικές για τα προϊόντα. Οι στοιχειομετρικοί συντελεστές είναι οι απόλυτες τιμές των στοιχειομετρικών αριθμών. Με άλλα λόγια, $a = |\nu_A| = -\nu_A$, αλλά $z = |\nu_Z| = \nu_Z$.

1.4.1 Κατευθυνόμενη Εξάσκηση

Υπολογίστε τη γραμμομοριακή ενέργεια Gibbs σχηματισμού $\Delta_f G_m^\circ$ του $\text{HCl}(g)$ στους 298 K, εάν η γραμμομοριακή ενθαλπία σχηματισμού $\Delta_f H_m^\circ$ είναι $-92.31 \text{ kJ mol}^{-1}$ και η γραμμομοριακή εντροπία σχηματισμού $\Delta_f S_m^\circ$ είναι $186.90 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

[Απάντηση: $-148.01 \text{ kJ mol}^{-1}$]

1.5 Λύση προβλημάτων

Η παρατήρηση είναι το θεμέλιο της εμπειρικής γνώσης και της επιστήμης. Υπάρχουν πολλά που μπορούν να αποκτηθούν από την περιγραφή. Ωστόσο, αν το μόνο που θέλετε είναι η περιγραφή, δεν έχετε παρά να παρακολουθήσετε ένα μάθημα τέχνης και να μην κάνετε ερωτήσεις, άλλωστε κι οι καλλιτέχνες αναζητούν το νόημα. Ως εκ τούτου, πρόκειται να υπερβούμε μια απλή διαδικασία περιγραφής.

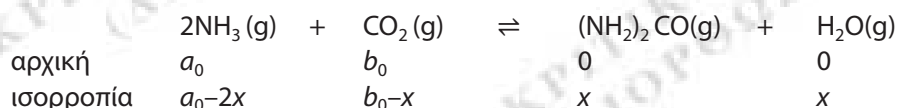
Μέχρι αυτό το σημείο της ακαδημαϊκής σας καριέρας, έχετε κυρίως χρησιμοποιήσει μόνο τα δύο πιο βασικά επίπεδα μάθησης: (1) την αποστήθιση και (2) την κατανόηση. Για να έχετε καλές επιδόσεις στη φυσικοχημεία, θα χρειαστεί να γίνεται ικανοί στα επόμενα τρία επίπεδα μάθησης, δηλαδή (3) στην εφαρμογή, (4) στην ανάλυση και (5) στην αξιολόγηση. Η άριστη γνώση όλων αυτών θα σας καθοδηγήσει στην εκτέλεση της έρευνας, η οποία απαιτεί το υψηλότερο επίπεδο μάθησης: (6) τη δημιουργία. Αυτό το μάθημα αφορά την επίλυση προβλημάτων - δηλαδή του τρόπου με τον οποίο αντιδρούν οι χημικές ουσίες μεταξύ τους, το πως αυτές ανταποκρίνονται στις αλλαγές των συνθηκών όπως η θερμοκρασία και η πίεση, καθώς και ποια είναι η βάση ορισμένων φυσικών ιδιοτήτων τους. Προσπαθώ να σας διδάξω μεθόδους επίλυσης χημικών προβλημάτων: Πως εφαρμόζοντας αυτό που διδάσκεστε σε νέες καταστάσεις να αναλύετε παραλλαγές των προβλημάτων και να αξιολογείτε τα αποτελέσματα. Στη μελλοντική σας σταδιοδρομία θα χρειαστεί να μάθετε διάφορα πράγματα. Είναι απίθανο να υπάρχει ένα εγχειρίδιο γραμμένο για τα περισσότερα από τα πράγματα που θα συναντήσετε. Στην επαγγελματική σας ζωή δεν θα βρείτε ποτέ ένα πραγματικό πρόβλημα να λύσετε στο οποίο θα σας δίνονται ακριβώς όλες οι σωστές πληροφορίες, στις σωστές μονάδες. Θα έρχεστε πάντα αντιμέτωποι είτε με πάρα πολλές πληροφορίες είτε με πολύ λίγες πληροφορίες και θα πρέπει να αποφασίσετε ποια μέρη είναι απαραίτητα. Η ικανότητα αντιμετώπισης προβλημάτων κάτω

από αυτές τις συνθήκες είναι μια σημαντική δεξιότητα. Είναι το θεμέλιο της ικανότητας των φυσικών χημικών / χημικών φυσικών να αντιμετωπίζουν προβλήματα που κυμαίνονται από την ατομική φυσική έως τη θερμοδυναμική, τη δυναμική των αντιδράσεων σε όλες τις φάσεις, μέσω της νανοεπιστήμης και πέρα από τη βιοχημεία στην αστροχημεία. Μαθαίνοντας να λύνετε προβλήματα είναι μια από τις σημαντικότερες δεξιότητες που θα αποκτήσετε σε αυτό το μάθημα.

Δεν υπάρχει μόνο μια μέθοδος για την επίλυση προβλημάτων. Ο καλύτερος τρόπος για να λύσετε ένα πρόβλημα είναι αυτός που δίνει τη σωστή απάντηση. Αν δείτε το δρόμο για την απάντηση, ακολουθείστε τον. Υπάρχουν συχνά πολλαπλές οδοί. Ωστόσο, αν κολλήσετε, πως θα ξαναρχίσετε; Αφήστε με να περιγράψω τα τέσσερα βασικά βήματα για την επίλυση προβλημάτων. Πιθανόν να μην είναι πάντα εφαρμόσιμα, αλλά το να ελέγξετε κάθε ένα από αυτά μπορεί να σας βοηθήσει να ξεπεράσετε το μπλοκάρισμα του συγγραφέα μπροστά στην κενή σελίδα.

1. Ξεκινήστε με μια ισορροπημένη αντίδραση (περιλαμβανομένων των φάσεων).
2. Σχεδιάστε ένα διάγραμμα.
3. Σχεδιάστε μια ευθεία γραμμή.
4. Απαντήστε στην ερώτηση που σας έχει τεθεί με κατάλληλες μονάδες.

Αυτά τα βήματα είναι προφανώς υπεραπλουστεύσεις ώστε να έχουμε αποτέλεσμα και ευκολία απομνημονεύσεως. Πάντα ξεκινήστε προσδιορίζοντας το σύστημα και πως αυτό αλλάζει. Οργανώστε τις πληροφορίες που έχετε διαθέσιμες. Αξιολογήστε τις φυσικές διεργασίες που συμβαίνουν. Αν δεν υπάρχει ένα διάγραμμα να σχεδιάσετε, τότε, για παράδειγμα, καταγράψτε την ποσότητα της ουσίας σε γραμμομόρια και τον τρόπο με τον οποίο αλλάζει. Αυτό το ονομάζω *διάγραμμα της αντίδρασης*. Για την αντίδραση της αέριας φάσης της αμμωνίας (αρχική συγκέντρωση a_0) με διοξείδιο του άνθρακα (αρχική συγκέντρωση b_0) ώστε να σχηματιστεί ισορροπία με την ουρία και το νερό (τα οποία δεν υπάρχουν αρχικά), έχει τη μορφή



Σημειώστε ότι μια σωστά ισορροπημένη αντίδραση περιλαμβάνει επίσης όλες τις ονομασίες των φάσεων.

Στη συνέχεια, καθορίστε ποιες εξισώσεις σχετίζονται με τα δεδομένα και τις απαντήσεις που αναζητάτε. Αν δεν κοινοποιείτε τα αποτελέσματά σας, τότε συμμετέχετε σε ένα χόμπι, δεν κάνετε επιστήμη. Έτσι, πάντα παρουσιάζουμε γραφήματα ή κατασκευάζουμε πίνακες. Η σχεδίαση μιας ευθείας γραμμής (ή η παρουσίαση των αποτελεσμάτων με άλλον κατάλληλο τρόπο) για ερμηνεία και η σαφήνεια είναι σημαντικό μέρος της ανάλυσης, της αξιολόγησης των μοντέλων και της εξαγωγής συμπερασμάτων. Σε πρώτη φάση, πρέπει πάντα να προσδιορίζετε ποια ερώτηση τίθεται και ποια δεδομένα έχετε στη διάθεσή σας. Αλλά η επίλυση προβλημάτων δεν ξεκινά πάντα από την αρχή και ακολουθεί μια γραμμική πορεία προς το τελευταίο βήμα. Μερικές φορές, πρέπει να εργαστείτε προς τα πίσω: κοιτάξτε το τελικό αποτέλεσμα που θέλετε και βρείτε το βήμα που θα οδηγούσε σε αυτό. Μερικές φορές, κοιτάζοντας το τέλος είναι το πιο σημαντικό βήμα για να σας δείξει από πού πρέπει να ξεκινήσετε.

Για την αποτελεσματική επίλυση προβλημάτων, πρέπει να σταματήσετε να σκέφτεστε μόνο τη σωστή απάντηση και να αρχίσετε να σκέφτεστε τη σωστή μέθοδο εύρεσης της απάντησης. Ένα αποκαλυπτικό επαναλαμβανόμενο σχόλιο στις αξιολογήσεις των φοιτητών για τη διδασκαλία μου είναι "σταματήστε να κάνετε παραδοχές και δείξτε μας την απάντηση." Η εκτέλεση παραδοχών είναι ένα από τα βασικά μέσα διδασκαλίας των τεχνικών που χρειάζεστε για την αποτελεσματική επίλυση προβλημάτων. Οι ασκήσεις "κατευθυνόμενη εξάσκηση" αποσκοπούν στην ενίσχυση αυτού του σκοπού. Οι κατευθυνόμενες εξασκήσεις αποσκοπούν να σας δημιουργήσουν τη συνήθεια να διακόπτετε την ανάγνωσή σας, να σταματάτε για να σκεφτείτε τι έχετε μόλις διαβάσει, να εκτελείτε έναν απλό υπολογισμό (ή να συμπληρώνετε τα ελλείποντα βήματα σε μια παραδοχή) και να βελτιώνετε την κατανόηση αυτού που μόλις διαβάσατε. Αποκτήστε αυτή τη συνήθεια, εκτελέστε την συχνά - ακόμα και όταν δεν υποδεικνύεται μια κατευθυνόμενη εξάσκηση - και η κατανόησή και η αντοχή σας στην επίλυση προβλημάτων θα αυξηθούν. Δημιουργήστε τις δικές σας κατευθυνόμενες εξασκήσεις για να συνηθίσετε και να αισθανθείτε άνετοι με το χειρισμό εξισώσεων και ιδεών. Εάν δεν καταλαβαίνετε μια κατευθυνόμενη εξάσκηση, ρωτήστε μια ερώτηση στη διάλεξη.

1.5.1 Κατευθυνόμενη Εξάσκηση

Αν $a_0 = b_0 = a$, φτιάξτε την αλγεβρική εξίσωση που απαιτείται για να βρείτε την τιμή του x για την αντίδραση της αμμωνίας και του διοξειδίου του άνθρακα για την παραγωγή ουρίας και νερού.

Υπόδειξη: Θα πρέπει να δημιουργήσετε μια εξίσωση παρόμοια με την εξίσωση 1.5 και στη συνέχεια συλλέξτε τους όρους για να βρείτε ένα πολυώνυμο τρίτης τάξης, το οποίο να το ορίσετε ίσο με το μηδέν.

[Απάντηση: $4x^3 - (8a - 1/K)x^2 + a^2x - a^3 + 4a^2 = 0$]

1.5.2 Εκτελώντας υπολογισμούς

Ένας υπολογισμός την ημέρα κρατάει την άγνοια μακριά. Όλοι οι υπολογισμοί γίνονταν κάποτε μόνο με το χέρι. Θα πρέπει να θεωρείτε την εκτέλεση υπολογισμών μόνο με ένα υπολογιστάκι τσέπης τόσο ξεπερασμένη σαν να χρησιμοποιείτε μόνο πίνακες λογαρίθμων και λογαριθμικό κανόνα. Σε αυτό το σημείο της επιστημονικής σας εκπαίδευσής και καριέρας είναι ώρα να χρησιμοποιήσετε υπολογιστές για τους υπολογισμούς και την παρουσίαση των δεδομένων. Το λογισμικό υπολογιστικών φύλλων είναι εντάξει για τον υπολογισμό βαθμών. Μπορεί να είναι μια καλή εισαγωγή στον επιστημονικό υπολογισμό, αλλά ένα υπολογιστικό φύλλο δεν επαρκεί για την αρμόζουσα ανάλυση των δεδομένων. Πρέπει να εξετάσετε το ενδεχόμενο να εισάγετε τον εαυτό σας σε πραγματικό λογισμικό ανάλυσης δεδομένων. Υπάρχουν πολλές επιλογές όπως το Igor Pro, Origin και SigmaPlot. Αυτός ο τύπος λογισμικού θα σας επιτρέψει να χειρίζεστε μεγάλα σύνολα δεδομένων, να εκτελείτε υπολογισμούς, να παρουσιάζετε δεδομένα και να προσαρμόζετε καμπύλες στα δεδομένα σας. Αν σκέφτεστε να κάνετε περαιτέρω σπουδές στη φυσικοχημεία, τότε θα πρέπει να συλλογιστείτε να μάθετε λογισμικό ικανό για αλγεβρικό και συμβολικό υπολογισμό καθώς και για απλούς υπολογισμούς, όπως Mathematica, MathCAD και MATLAB.

1.5.3 Μονάδες και παρουσίαση των αποτελεσμάτων

Ένας αριθμός που παρουσιάζεται χωρίς τις κατάλληλες μονάδες είναι το επιστημονικό ισοδύναμο του μηδενιστικού σχετικισμού. Σαράντα δύο είναι η απάντηση σε όλα, απλά δεν ξέρουμε ποιος είναι ο συντελεστής μετατροπής στις μονάδες που πραγματικά έχουν νόημα. Αυτός είναι ένας δραματικός τρόπος να πούμε ότι καμία απάντηση δεν είναι σωστή χωρίς τις σωστές μονάδες. Πολλά από τα λάθη σας θα οφείλονται στη μη χρήση σωστών μονάδων ή σωστών παραγόντων μετατροπής. Δεν είναι πάντα εύκολο, αλλά είναι κάτι που θα πρέπει να ελέγχετε, και ένας έλεγχος στις μονάδες είναι ένας από τους πιο βέβαιους τρόπους να αποφασίσετε αν ο υπολογισμός σας έχει γίνει σωστά. Μπορείτε να χειριστείτε αριθμητικές τιμές και μονάδες, όπως και τα σύμβολα που αντιπροσωπεύουν φυσικές ποσότητες, με τους συνηθισμένους κανόνες της άλγεβρας. Αφήστε την άλγεβρα να γίνει ο φίλος σας και χρησιμοποιήστε την συνεχώς.

Ένα άλλο βασικό θέμα που συχνά προκαλεί σύγχυση είναι η ανάγνωση των δεδομένων σε πίνακες και εικόνες. Επισημαίνετε πάντα τις στήλες και τους άξονες με μονάδες. Η στενογραφία συχνά χρησιμοποιείται για να αποφευχθεί η επανάληψη των τάξεων μεγέθους. Η καλύτερη πρακτική είναι να διαχωρίσετε τις μονάδες και να συμπεριλάβετε κατάλληλα και σαφώς ενδείξεις τάξεων μεγέθους. Σημειώστε τις ισοδυναμίες στον πίνακα που ακολουθεί. Σημειώστε επίσης ότι οι γραμματοσειρές στις μονάδες είναι τύπου Roman (όρθια γράμματα), ενώ στις μεταβλητές είναι τύπου Italics (πλάγια γράμματα) και ότι εμφανίζεται ένα κενό μεταξύ αριθμών και μονάδων. Ο χειρισμός των μεγεθών και των μονάδων των φυσικών ποσοτήτων είναι γνωστός ως ποσοτικός λογισμός. Για περισσότερες πληροφορίες δείτε την Πράσινη Βίβλο της IUPAC (IUPAC Green Book).

T/K	T^{-1}/K^{-1}	K/T	$10^3 K/T$	$T^{-1}/(10^{-3} K^{-1})$
300	3.33×10^{-3}	3.33×10^{-3}	3.33	3.33

p/Pa	$p/(10^6 Pa)$	p/MPa	$\ln(p/Pa)$	$\ln(p/MPa)$
1.45×10^6	1.45	1.45	14.19	0.3716

1.6 Μερικές συμβάσεις

Αυτή η ενότητα περιλαμβάνει κάποιες συμβάσεις συμβολισμού, οι οποίες περιέχονται στους Πίνακες 1.1 έως 1.5 και θα χρησιμοποιηθούν καθ' όλη την έκταση αυτού του βιβλίου. Όλες οι συμβάσεις ευθυγραμμίζονται με την Πράσινη Βίβλο της IUPAC. Υπάρχουν διάφοροι τύποι αντίδρασης που θα συναντήσουμε και θα χρησιμοποιήσουμε σύμβολα για να τους διακρίνουμε. Οι αντιδράσεις που συμβαίνουν σε μοριακό επίπεδο σε ένα βήμα είναι στοιχειώδεις αντιδράσεις. Αυτές οι αντιδράσεις διακρίνονται μεταξύ τους βάσει του αριθμού των χημικών ειδών που συμμετέχουν ως αντιδρώντα. Οι *στοιχειώδεις αντιδράσεις* μπορεί να περιλαμβάνουν ένα, δύο ή τρία χημικά είδη και ονομάζονται μονομοριακές, διμοριακές ή τριμοριακές, αντίστοιχα. Ένα βέλος που πηγαίνει από τα αριστερά προς τα δεξιά χρησιμοποιείται για να δείξει την κατεύθυνση της αντίδρασης.



Έτσι, ο αριθμός των χημικών ειδών στα αριστερά καθορίζει τη *μοριακότητα* της αντίδρασης. Εάν το στοιχειώδες βήμα είναι αντιστρεπτό, μπορεί να προχωρήσει είτε προς τα εμπρός είτε προς τα πίσω και αυτό υποδεικνύεται με δύο βέλη αντίθετης κατεύθυνσεως.



Ένας *μηχανισμός αντίδρασης* είναι το σύνολο των στοιχειωδών βημάτων που συμβαίνουν κατά τη διάρκεια μιας συνολικής αντίδρασης. Εάν ο μηχανισμός περιέχει δύο ή περισσότερα βήματα, είναι ένας *σύνθετος μηχανισμός*. Η *συνολική αντίδραση* είναι το άθροισμα των στοιχειωδών βημάτων (κάποια από τα οποία ίσως πρέπει να υπολογίζονται περισσότερες από μία φορές) και έχει την κατάλληλη στοιχειομετρία για όλη την αντίδραση. Η συνολική αντίδραση έχει τα αντιδρώντα και τα προϊόντα της διαχωρισμένα με ένα σύμβολο ισότητας (ίσον). Έτσι, η συνολική αντίδραση που σχηματίζει C και D από το 2A, μέσω ενός σύνθετου μηχανισμού δύο σταδίων παρουσιάζεται παρακάτω



Το A είναι αντιδρόν, τα C και D είναι προϊόντα, το B είναι ένα ενδιάμεσο προϊόν. Η αντίδραση δεν περιγράφεται από τη μοριακότητα, αυτό γίνεται μόνο σε στοιχειώδεις αντιδράσεις. Η αντίδραση υποδεικνύεται επίσης από αντίθετα βέλη με ένα μόνο κτύπημα στις κεφαλές τους. Αυτή η σύμβαση χρησιμοποιείται σε όλη την έκταση του βιβλίου.



Πίνακας 1.1 Καταστάσεις συσσωματώσεως.

Σύμβολο	Κατάσταση	Σύμβολο	Κατάσταση
a or ads	είδη προσροφημένα πάνω σε μια επιφάνεια	am	άμορφο στερεό
aq	υδατικό διάλυμα	aq, ∞	υδατικό διάλυμα, άπειρη αραιώση
cd	συμπυκνωμένη φάση, δηλαδή υγρή ή στερεά	cr	κρυσταλλικό
f	ρευστή φάση, δηλαδή υγρή ή αέρια	g	αέριο ή ατμός
l	υγρό	lc	υγρός κρύσταλλος
mon	μονομερής μορφή	n	νηματική φάση
pol	πολυμερής μορφή	s	στερεό
sat	κορεσμός ή κορεσμένος	sat l	κορεσμένο υγρό
sln	διάλυμα	vit	υαλώδης

Πίνακας 1.2 Θεμελιώδη μεγέθη του SI.

Θεμελιώδες μέγεθος	Όνομα	Σύμβολο
μήκος	μέτρο	m
μάζα	χιλιόγραμμα	kg
χρόνος	δευτερόλεπτο	s
ηλεκτρικό ρεύμα	αμπέρ	A
θερμοδυναμική θερμοκρασία	κέλβιν	K
ποσότητα ουσίας	γραμμομόριο	mol
φωτεινή ένταση	καντέλα	cd

Πίνακας 1.3 Παράγωγα μεγέθη του SI.

Παράγωγο μέγεθος	Όνομα	Σύμβολο	Εκφραζόμενο σε άλλες μονάδες του SI
επίπεδη γωνία	radian	rad	$m\ m^{-1} = 1$
στερεά γωνία	steradian	sr	$m^2\ m^{-2} = 1$
συχνότητα	hertz	Hz	s^{-1}
δύναμη	newton	N	$m\ kg\ s^{-2}$
πίεση, τάση	pascal	Pa	$N\ m^{-2} = m^{-1}\ kg\ s^{-2}$
ενέργεια, έργο, θερμότητα	joule	J	$N\ m = m^2\ kg\ s^{-2}$
ισχύς, ροή ακτινοβολίας	watt	W	$J\ s^{-1} = m^2\ kg\ s^{-3}$
ηλεκτρικό φορτίο	coulomb	C	A s
ηλεκτρικό δυναμικό, ηλεκτρεγερτική δύναμη	volt	V	$J\ C^{-1} = m^2\ kg\ s^{-3}\ A^{-1}$
ηλεκτρική αντίσταση	ohm	Ω	$V\ A^{-1} = m^2\ kg\ s^{-3}\ A^{-2}$
ηλεκτρική αγωγιμότητα	siemens	S	$\Omega^{-1} = m^{-2}\ kg^{-1}\ s^3\ A^2$
ηλεκτρική χωρητικότητα	farad	F	$C\ V^{-1} = m^{-2}\ kg^{-1}\ s^4\ A^2$
μαγνητική ροή	weber	Wb	$V\ s = m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
πυκνότητα μαγνητικής ροής	tesla	T	$Wb\ m^{-2} = kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
επαγωγή	henry	H	$V\ A^{-1}\ s = m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-2}$
καταλυτική δραστηριότητα	katal	kat	$mol\ s^{-1}$

Πίνακας 1.4 Προθέματα του SI.

Υποπολλαπλάσιο	Όνομα	Σύμβολο	Πολλαπλάσιο	Όνομα	Σύμβολο
10^{-1}	deci	d	10^1	deca	da
10^{-2}	centi	c	10^2	hecto	h
10^{-3}	milli	m	10^3	kilo	k
10^{-6}	micro	μ	10^6	mega	M
10^{-9}	nano	n	10^9	giga	G
10^{-12}	pico	p	10^{12}	tera	T
10^{-15}	femto	f	10^{15}	peta	P
10^{-18}	atto	a	10^{18}	exa	E
10^{-21}	zepto	z	10^{21}	zetta	Z
10^{-24}	yocto	y	10^{24}	yotta	Y

Πίνακας 1.5 Σύμβολα, τελεστές και συναρτήσεις.

Περιγραφή	Σύμβολο
Σήματα και σύμβολα	
αριστερό μέλος εξισώσεως	LHS
δεξιό μέλος εξισώσεως	RHS
ίσο	=
άνισο	≠
ταυτίζεται	≡
εξ ορισμού ίσο	:=
προσεγγιστικό ίσο	≈
ασυμπτωτικά ίσο	≍
αντιστοιχεί	≐
ανάλογο	~ , ∞
τείνει	→
άπειρο	∞
μικρότερο από	<
μεγαλύτερο από	>
μικρότερο ή ίσο	≤
μεγαλύτερο ή ίσο	≥
πολύ λιγότερο από	≪
πολύ μεγαλύτερο από	≫
Πράξεις	
μέτρο του a	$ a $
μέση τιμή του a	$\langle a \rangle, \bar{a}$
n παραγοντικό	$n!$
άθροισμα των a_i	$\sum a_i, \sum_i a_i, \sum_{i=1}^n a_i$
γινόμενο των a_i	$\prod a_i, \prod_i a_i, \prod_{i=1}^n a_i$
Συναρτήσεις	
βάση των φυσικών λογαρίθμων	e
εκθετικό του x	$\exp x, e^x$
λογάριθμος με βάση το a του a	$\log_a x$
φυσικός λογάριθμος του x	$\ln x$
λογάριθμος με βάση το 10 του x	$\lg x$
μεταβολή του x	$\Delta x = x$ (τελικό) - x (αρχικό)
απειροστή μεταβολή του f	δf
όριο του $f(x)$ όταν το x τείνει στο a	$\lim_{x \rightarrow a} f(x)$
πρώτη παράγωγος του f	$df/dx, f', (d/dx)f$
δεύτερη παράγωγος του f	$d^2f/dx^2, f''$
μερική παράγωγος του f	$\partial f/\partial x$
ολικό διαφορικό της f	df
(συναρτήσεως πολλών μεταβλητών)	
τέλειο διαφορικό της f	$\bar{d}f$
(συναρτήσεως μίας μεταβλητής)	
ατελές διαφορικό της f	δf
(μη ακριβές, μη τέλειο)	
ολοκλήρωμα της $f(x)$	$\int f(x) dx, \int dx f(x)$
δ του Kronecker	$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{αν } i=j \\ 0 & \text{αν } i \neq j \end{cases}$
συνάρτηση δέλτα του Dirac	$\delta(x), \int f(x) \delta(x) dx = f(0)$
συνάρτηση μοναδιαίου βήματος,	$\varepsilon(x), H(x), h(x),$
συνάρτηση Heaviside	$\varepsilon(x) = 1 \text{ για } x > 0, \varepsilon(x) = 0 \text{ για } x < 0$

Πίνακας 1.5 (συνέχεια)

Περιγραφή	Σύμβολο
συνάρτηση Γ	$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$ $\Gamma(n+1) = n!$ για θετικούς ακεραίους n
συνέλιξη των συναρτήσεων f και g	$f^*g = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-x')g(x') dx'$
Μιγαδικοί αριθμοί	
τετραγωνική ρίζα του -1 , $\sqrt{-1}$	i
πραγματικό μέρος του $z = a + ib$	$\text{Re } z = a$
φανταστικό μέρος του $z = a + ib$	$\text{Im } z = b$
μέτρο του $z = a + ib$	$ z = (a^2 + b^2)^{1/2}$
όρισμα του $z = a + ib$	$\arg z; \tan(\arg z) = b/a$
μιγαδικός συζυγής του $z = a + ib$	$z^* = a - ib$
Διανύσματα	
διάνυσμα \mathbf{a}	\mathbf{a}, \vec{a}
καρτεσιανές συνιστώσες του \mathbf{a}	a_x, a_y, a_z
μοναδιαία ανύσματα του καρτεσιανού συστήματος συνεταγμένων	$\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ ή i, j, k
εσωτερικό γινόμενο	$\vec{a} \cdot \vec{b}$ ή $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$
εξωτερικό γινόμενο	$\vec{a} \times \vec{b}$ ή $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$
τελεστής ανάδελτα	$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$
τελεστής Λαπλάς ή Λαπλασιανή	$\nabla^2 = \mathbf{e}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathbf{e}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \mathbf{e}_z \frac{\partial^2}{\partial z^2}$
Πίνακες	
πίνακας με στοιχεία A_{ij}	\mathbf{A}
γινόμενο των πινάκων \mathbf{A} και \mathbf{B}	\mathbf{AB} , όπου $(\mathbf{AB})_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk}$
μοναδιαίος πίνακας	\mathbf{E}, \mathbf{I}
αντίστροφος τετραγωνικός πίνακας \mathbf{A}	\mathbf{A}^{-1}
ανάστροφος πίνακας \mathbf{A}	$\mathbf{A}^T, \check{\mathbf{A}}$
μιγαδικός συζυγής πίνακας \mathbf{A}	\mathbf{A}^*
συζυγής ανάστροφος (προσαρτημένος) ή ερμιτιανός συζυγής πίνακας \mathbf{A}	\mathbf{A}^H ή \mathbf{A}^+ , όπου $(\mathbf{A}^+)^{ij} = A_{ji}^*$
ίχνος τετραγωνικού πίνακας \mathbf{A}	$\sum_i A_{ii}, \text{tr } \mathbf{A}$
ορίζουσα τετραγωνικού πίνακας \mathbf{A}	$\det \mathbf{A}, \mathbf{A} $

ΣΥΝΟΨΗ ΣΗΜΑΝΤΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ

Θα πρέπει να είστε ήδη εξοικειωμένοι-ες με τις εξισώσεις που ακολουθούν, από την προηγούμενη εισαγωγή σας στη χημεία. Θα μάθουμε πολύ περισσότερα γι' αυτές, τους περιορισμούς και τις αποδείξεις τους, αλλά θα πρέπει να είστε προετοιμασμένοι-ες να τις χρησιμοποιήσετε από τώρα.

$m = M/N_A$	Η μοριακή μάζα m ισούται με τη γραμμομοριακή μάζα M διαιρεμένη με τη σταθερά Avogadro N_A .
$n = m/M = N/N_A$	Η ποσότητα ουσίας (σε γραμμομόρια) n ισούται με τη μοριακή μάζα m διαιρεμένη με τη γραμμομοριακή μάζα M ή με τον αριθμό των μορίων N διαιρεμένο με τη σταθερά Avogadro.
$pV = nRT$	Ο νόμος των ιδανικών αερίων: πίεση p , όγκος V , ποσότητα ουσίας n , σταθερά ιδανικών αερίων R , απόλυτη θερμοκρασία T .
$R = N_A k_B$	Η σταθερά ιδανικών αερίων ανά γραμμομόριο R είναι απλά το γινόμενο της σταθεράς ιδανικών αερίων ανά μόριο k_B (κοινώς ονομάζεται σταθερά Boltzmann) επί τη σταθερά Avogadro N_A .

$q = nC_m \Delta T$	Η θερμότητα q όταν n moles ουσίας με θερμοχωρητικότητα C_m αλλάζουν θερμοκρασία κατά ΔT .
$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$	Η μεταβολή της ενέργειας Gibbs ΔG σχετίζεται με τη μεταβολή της ενθαλπίας ΔH και της εντροπίας ΔS .
$K = \frac{[C][D]}{[A][B]}$	Η σταθερά ισορροπίας με τις συγκεντρώσεις των συμμετεχόντων σε μια αμφίδρομη αντίδραση $A + B \rightleftharpoons C + D$.
$\Delta G^\circ = -RT \ln K$	Η σχέση της μεταβολής της πρότυπης ελεύθερης ενέργειας Gibbs της αντίδρασης σε σχέση με τη σταθερά ισορροπίας K .
$k = Ae^{-E_a/RT}$	Η εξίσωση Arrhenius σχετίζει τη σταθερά ταχύτητας (ή σταθερά ρυθμού) k με τον προεκθετικό παράγοντα A και την ενέργεια ενεργοποίησης E_a .
$E = h\nu$	Η ενέργεια του φωτονίου ισούται με το γινόμενο της σταθεράς του Planck h και της συχνότητας του φωτονίου ν .
$c = \lambda\nu$	Η ταχύτητα του φωτός ισούται με το γινόμενο του μήκους κύματος λ και της συχνότητας ν .
$E_k = \frac{1}{2}mv^2$	Η κινητική ενέργεια ισούται με το μισό γινόμενο της μάζας και του τετραγώνου της ταχύτητας.
Μπορεί να μην είστε εξοικειωμένοι-ες με τις παρακάτω εξισώσεις, αλλά καθώς θα τις κατανοείτε, όπως και όσες αναφέρθηκαν προηγουμένως, θα αναπτυχθεί η κατανοήσή σας για τη χημεία.	
$E = E^\circ - (RT/zF) \ln Q$	Η εξίσωση του Nerst σχετίζει το δυναμικό ηλεκτροχημικού στοιχείου E (emf) με το κανονικό δυναμικό E° , το σθένος της ηλεκτροχημικής αντίδρασης z και το πηλίκο της αντίδρασης Q . F είναι η σταθερά Faraday.
$K = k_{\text{ευθείας}} / k_{\text{αντίστροφη}}$	Οι σταθερές ρυθμού (ταχύτητας) μιας αμφίδρομης στοιχειώδους αντιδράσεως σχετίζονται με τη σταθερά ισορροπίας της.
$R = k[A]^a[B]^b$	Ο ρυθμός R μιας αντίδρασης δίνεται από έναν εμπειρικό νόμο που αποτελείται από τη σταθερά ρυθμού (ταχύτητας) k και όρους συγκέντρωσης, σε αυτή την περίπτωση, η συγκέντρωση του A είναι υψωμένη στην a και η συγκέντρωση του B είναι υψωμένη στην b . Η μορφή του νόμου εξαρτάται από την αντίδραση και τις συνθήκες της αντίδρασης.
$S = k_B \ln \Omega$	Η εντροπία S είναι ανάλογη με τη σταθερά Boltzmann k_B επί τον φυσικό λογάριθμο του αριθμού των μικροκαταστάσεων Ω .
$\mu = \mu^\circ + RT \ln a$	Το χημικό δυναμικό μ καθορίζεται από την δραστηρότητα a . Το μ° είναι το χημικό δυναμικό της προτύπου καταστάσεως.

Ασκήσεις

- 1.1** Θα πρέπει να γνωρίζετε πως να γράφετε ισορροπημένες χημικές εξισώσεις. Έχετε εισαχθεί στην ενθαλπία αντίδρασης και θα πρέπει να είστε σε θέση να υπολογίζετε την ποσότητα θερμότητας που απελευθερώνεται ή καταναλώνεται σε μια αντίδραση που πραγματοποιείται υπό σταθερή πίεση (όπως σε ένα ποτήρι ζέσεως στο εργαστήριο). Η αιθανόλη έχει θερμότητα καύσης 1367 kJ mol^{-1} , γραμμομοριακή μάζα 46.07 g mol^{-1} και πυκνότητα 0.7893 g cm^{-3} . Το οκτάνιο (σημαντικό συστατικό της βενζίνης) έχει θερμότητα καύσης 5450 kJ mol^{-1} , γραμμομοριακή μάζα $114.23 \text{ g mol}^{-1}$ και πυκνότητα 0.7025 g cm^{-3} . (a) Γράψτε τις ισορροπημένες αντιδράσεις καύσης για την αιθανόλη και το οκτάνιο. (b) Υπολογίστε την ενθαλπία που απελευθερώνεται από την καύση: i) 1.00 l αιθανόλης, και ii) 1.00 l οκτανίου. (c) Πόσο λιγότερο αποτελεσματική (σε ποσοστό) είναι η καύση της αιθανόλης σε σύγκριση με του οκτανίου σε κατ'όγκο βάση;
- 1.2** Θα πρέπει να γνωρίζετε πως να γράφετε ισορροπημένες χημικές εξισώσεις. Έχετε ήδη εισαχθεί στην ενθαλπία αντίδρασης και θα πρέπει να είστε σε θέση να υπολογίζετε την ποσότητα θερμότητας που απελευθερώνεται ή καταναλώνεται σε μια αντίδραση που πραγματοποιείται υπό σταθερή πίεση (όπως σε ένα ποτήρι ζέσεως στο εργαστήριο). Το μεθάνιο έχει θερμότητα καύσης $890.8 \text{ kJ mol}^{-1}$. Ο γραφίτης έχει θερμότητα καύσης $393.5 \text{ kJ mol}^{-1}$. (a) Γράψτε τις ισορροπημένες αντιδράσεις καύσης για το μεθάνιο και το γραφίτη. (b) Υπολογίστε την ενθαλπία που απελευθερώνεται ανά γραμμομόριο CO_2 που σχηματίζεται με την καύση καθενός. (c) Λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι το CH_4 είναι το βασικό συστατικό του φυσικού αερίου και ο γραφίτης

του γαιάνθρακα, ποιο είναι το διαφορετικό ποσοστό σε γραμμομόρια CO₂ που παράγεται από την καύση γαιάνθρακα σε σύγκριση με το φυσικό αέριο, προκειμένου να παραχθεί η ίδια ποσότητα θέρμανσης;

1.3 Οι μονάδες, οι μετατροπές τους και η αναδιάταξη των εξισώσεων είναι ατελείωτα θέματα. Συνήθως θα καταλήγουμε με απαντήσεις σε μονάδες στο SI αλλά τα προβλήματα του πραγματικού κόσμου έρχονται συχνά σε άλλες μονάδες και θα χρειάζεται να μπορείτε να χειρίζεστε διαφορετικούς τύπους μονάδων. Έχετε επίσης διδαχθεί τον νόμο των ιδανικών αερίων και πρέπει να ξέρετε πώς να τον χειριστείτε. Θα πρέπει επίσης να είστε σε θέση να κοιτάζετε τους αριθμούς και να μπορείτε να τους ταξινομείτε ως προς το πόσο μεγάλοι ή μικροί είναι. (a) Ποιες είναι οι μονάδες του SI (και η συντομογραφία των μονάδων) για το μήκος, τον όγκο, το χρόνο, την ποσότητα μιας χημικής ουσίας, τη μάζα, την πίεση και τη συγκέντρωση; (b) Στις ΗΠΑ καταναλώθηκαν 18.8 εκατομμύρια βαρέλια (Mbbbl) ακατέργαστου πετρελαίου ανά ημέρα το 2011. Στην πετρελαιοκηλίδα της BP στον κόλπο του Μεξικού η διαρροή πετρελαίου ανήλθε περίπου στα 200 εκατομμύρια γαλόνια ακατέργαστου πετρελαίου. (i) Υπάρχουν 42 γαλόνια (gal) ανά βαρέλι (bbl). Η πυκνότητα του ακατέργαστου πετρελαίου είναι περίπου 0.869 g cm⁻³. Το ακατέργαστο πετρέλαιο είναι περίπου 84.8% άνθρακας κατά μάζα. Πόσα γραμμομόρια C καταναλώνονται καθημερινά στις ΗΠΑ; (ii) Υπολογίστε τον όγκο του πετρελαίου που χύθηκε σε λίτρα και σε βαρέλια και υπολογίστε το ποσοστό του συνολικού πετρελαίου που χύθηκε σε σχέση με την καθημερινή χρήση του στις ΗΠΑ. (c) Αν όλος αυτός ο άνθρακας μετατρεπόταν σε CO₂, πόσο όγκο σε m³ θα καταλάμβανε σε ατμοσφαιρική πίεση και σε παγκόσμια μέση θερμοκρασία επιφάνειας 14 °C;

1.4 Οι μονάδες, οι μετατροπές τους και η αναδιάταξη των εξισώσεων είναι ατελείωτα θέματα. Συνήθως θα καταλήγουμε με απαντήσεις σε μονάδες στο SI αλλά τα προβλήματα του πραγματικού κόσμου έρχονται συχνά σε άλλες μονάδες και θα χρειάζεται να μπορείτε να χειρίζεστε διαφορετικούς τύπους μονάδων. Έχετε επίσης διδαχθεί τον νόμο των ιδανικών αερίων και πρέπει να ξέρετε πώς να τον χειριστείτε. Θα πρέπει επίσης να είστε σε θέση να κοιτάζετε τους αριθμούς και να μπορείτε να τους ταξινομείτε ως προς το πόσο μεγάλοι ή μικροί είναι. (a) Ποιες είναι οι μονάδες του SI (και η συντομογραφία των μονάδων) για το μήκος, τον όγκο, το χρόνο, την ποσότητα μιας χημικής ουσίας, τη μάζα, την πίεση και τη συγκέντρωση; (b) Θα πρέπει να μάθετε πως να ελέγχετε τις απαντήσεις αναλύοντας τις μονάδες. Επιβεβαιώστε ότι η γραμμομοριακή εντροπία που έχει υπολογιστεί από την εξίσωση Sackur–Tetrode δίνει την αναμενόμενη απάντηση σε μονάδες στο SI της ενέργειας ανά μονάδα απόλυτης θερμοκρασίας ανά ποσότητα ουσίας. Η εξίσωση Sackur–Tetrode είναι

$$S_m = R \ln \left(\frac{RTe^{5/2}}{\Lambda^3 N_A p} \right)$$

όπου R είναι η παγκόσμια σταθερά των αερίων, Λ είναι το θερμικό μήκος κύματος σε μέτρα, N_A η σταθερά Avogadro, p είναι η πίεση, και T η απόλυτη θερμοκρασία. (c) Μια κανονική μπάλα ποδοσφαίρου στην Εθνική Ποδοσφαιρική Ομοσπονδία σύμφωνα με τους κανόνες, αλλά όχι απαραίτητα σε ορισμένες ομάδες, πρέπει να φουσκωθεί από "12.5 έως 13.5 rounds". Υποθέτοντας ως αρχική πίεση αυτή των 13 "rounds" (δηλαδή 13 psig) στους 25 °C και σε σταθερό όγκο, ποια είναι η πίεση σε Pa της ποδοσφαιρικής μπάλας στους 0 °C;

1.5 Θα πρέπει να μάθετε πως να ελέγχετε τις απαντήσεις αναλύοντας τις μονάδες. Επιβεβαιώστε ότι ο ρυθμός πρόσκρουσης (ροή) που υπολογίστηκε από την εξίσωση Hertz–Knudsen δίνει την αναμενόμενη απάντηση σε μονάδες στο SI. Η εξίσωση Hertz–Knudsen είναι

$$Z_w = \frac{N_A p}{(2\pi MRT)^{1/2}}$$

1.6 Θα πρέπει να γνωρίζετε πως να χειρίζεστε γραφήματα και να ταιριάζετε καμπύλες πάνω στα πειραματικά σημεία. Εξοικειωθείτε με ένα πρόγραμμα ανάλυσης δεδομένων και θα γίνει πολύ ευκολότερος ο υπολογισμός μερικών προβλημάτων. Θα πρέπει να γνωρίζετε πως να χειρίζεστε λογαρίθμους και pH.

a Ποια είναι η κλίση και η τεταγμένη επί την αρχή y ενός διαγράμματος του φυσικού λογαρίθμου της σταθεράς ταχύτητας (k είναι η σταθερά ταχύτητας) ως προς την αντίστροφη θερμοκρασία (δηλαδή $1/T$ με T σε K) για τα παρακάτω δεδομένα; Συμπεριλάβετε ένα γράφημα των δεδομένων στην απάντησή σας.

$T/^{\circ}\text{C}$	25	50	75	100	150
k/s^{-1}	5.55×10^7	1.41×10^8	3.15×10^8	6.31×10^8	1.98×10^9

b Ποια είναι η συγκέντρωση των H^+ και OH^- στο νερό σε pH 2.5 και σε 25 $^{\circ}\text{C}$;

- 1.7** Θα πρέπει να γνωρίζετε πως να χειρίζεστε γραφήματα και να ταιριάζετε καμπύλες πάνω στα πειραματικά σημεία. Εξοικειωθείτε με ένα πρόγραμμα ανάλυσης δεδομένων και θα γίνει πολύ ευκολότερος ο υπολογισμός μερικών προβλημάτων. Θα πρέπει να γνωρίζετε πως να χειρίζεστε λογαρίθμους και pH. (a) Ποια είναι η κλίση και η τεταγμένη επί την αρχή y ενός διαγράμματος του φυσικού λογαρίθμου της σταθεράς ταχύτητας (k είναι η σταθερά ταχύτητας) ως προς την αντίστροφη θερμοκρασία (δηλαδή $1/T$ με T σε K) για τα παρακάτω δεδομένα; Συμπεριλάβετε ένα γράφημα των δεδομένων στην απάντησή σας. (b) Ποια είναι η συγκέντρωση των H^+ και OH^- στο νερό σε pH 9.72 και σε 25 $^{\circ}\text{C}$;

$T/^{\circ}\text{C}$	250	275	300	325	350
k/s^{-1}	1.07×10^{-7}	8.05×10^{-7}	5.92×10^{-6}	3.42×10^{-5}	1.72×10^{-4}

- 1.8** Δεν μπορείτε να περάσετε αυτό το μάθημα χωρίς να μπορείτε να χρησιμοποιήσετε άλγεβρα. Θα χρειαστεί επίσης να εκτελείτε βασικούς χειρισμούς ολοκληρωτικού και διαφορικού λογισμού.

a Λύστε την εξίσωση $x^2 + x - 20 = 0$, δηλαδή βρείτε τις ρίζες της.

b Υπολογίστε τη παράγωγο των

$$y = c_0 + c_1 x + c_2 x^2, \quad \frac{dy}{dx} =$$

$$y = 22 \exp(-1.9x) = 22e^{-1.9x}, \quad \frac{dy}{dx} =$$

$$y = \ln x, \quad \frac{dy}{dx} =$$

c Υπολογίστε τα ολοκληρώματα

$$\int 2x^3 dx =$$

$$\int \frac{k}{x} dx =$$

$$\int 24 \exp(32x) dx =$$

- 1.9** Δεν μπορείτε να περάσετε αυτό το μάθημα χωρίς να μπορείτε να χρησιμοποιήσετε άλγεβρα. Θα χρειαστεί επίσης να εκτελείτε βασικούς χειρισμούς ολοκληρωτικού και διαφορικού λογισμού. (a) Λύστε την εξίσωση $2x^2 + 5x - 13 = 0$, δηλαδή βρείτε τις ρίζες της. (b) Υπολογίστε τη παράγωγο των

$$y = c_0 + c_1 x^3 + c_2 x^5, \quad \frac{dy}{dx} =$$

$$y = a \exp(-2.3x) = a e^{-2.3x}, \quad \frac{dy}{dx} =$$

$$y = \ln(ax), \quad \frac{dy}{dx} =$$

(c) Υπολογίστε τα ολοκληρώματα

$$\int 2 + x^2 dx =$$

$$\int \frac{k}{x} dx =$$

$$\int 15e^{-1.5x} dx =$$

- 1.10** Ένα βάζο όγκου 22.4 dm^3 περιέχει 2.0 mol H_2 και 1.0 mol Xe στους 273.15 K . Υπολογίστε το γραμμομοριακό κλάσμα κάθε συστατικού, τις μερικές πιέσεις τους και τη συνολική τους πίεση.
- 1.11** Πολλές πρωτεΐνες όταν είναι καλά συμπυκνμένες έχουν πυκνότητα περίπου 1400 kg m^{-3} . Θεωρώντας προσεγγιστικά την πρωτεΐνη ως σφαίρα, χρησιμοποιήστε τον τύπο για πυκνότητα ($\rho = m / V$) για να υπολογίσετε την ακτίνα μιας πρωτεΐνης με γραμμομοριακή μάζα 100 kDa .
- 1.12** Για τα δεδομένα του παρακάτω πίνακα, χρησιμοποιείστε το Igor Pro (ή άλλο πρόγραμμα) για να σχεδιάσετε τα δεδομένα (οι άξονες να ονομαστούν καταλλήλως με τις σωστές μονάδες), αλλάξτε τα σημεία των δεδομένων σε γεμάτους κύκλους, και προσαρμόστε τα σημεία σε ευθεία γραμμή. Χρησιμοποιήστε την Προσθήκη Σχολιασμού για να γράψετε το όνομά σας και τα αποτελέσματα της προσαρμογής απευθείας στο γράφημα. Εκτυπώστε το γράφημα που αναλύθηκε πλήρως και σχολιάστηκε.

Χρόνος / s	Θέση / m
1.53	1.20
2.62	33.5
3.97	45.2
7.60	157
15.2	280
21.9	440
36.3	890
50.1	1003
62.9	1629

- 1.13** Για τη συνάρτηση

$$f(x) = (2x^3 - 6x^2 + 17)e^{-(2x^2+1)}$$

χρησιμοποιήστε το λογισμικό Mathematica (ή άλλο) για να υπολογίσετε το αόριστο ολοκλήρωμα της $f(x)$ και να βρείτε τη πρώτη και τη δεύτερο παράγωγο της $f(x)$. Στη συνέχεια, υπολογίστε το ορισμένο ολοκλήρωμα της $f(x)$ από το -2 έως το 2 . Σχεδιάστε την $f(x)$ από το -2 έως το 2 . Πληκτρολογήστε το όνομά σας στο τετράδιο εργασιών και εκτυπώστε το.

- 1.14** Με τη βοήθεια ισορροπημένων χημικών αντιδράσεων, δείξτε τη διαφορά μεταξύ της καύσης του μεθανίου που εκτελείται ισόθερμα στους 298 K και ισόθερμα στους 400 K .
- 1.15** Η μάζα του πρωτονίου είναι 1.007 u . Η μάζα του δευτερίου είναι 2.014 u . Υπολογίστε τη διαφορά των μαζών, την αναλογία των μαζών, την ποσοστιαία διαφορά σε σχέση με το πρωτόνιο, την ποσοστιαία διαφορά σε σχέση με το δευτέριο, και την ποσοστιαία διαφορά σε σχέση με το μέσο όρο των μαζών.
- 1.16** Υπολογίστε τα γραμμομοριακό κλάσμα και τη γραμμομοριακή συγκέντρωση όταν 1.00 g NaCl διαλύονται σε 100 g νερού στους $25 \text{ }^\circ\text{C}$. Η πυκνότητα του νερού είναι 0.997 g cm^{-3} .
- 1.17** Λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι η ατμόσφαιρα είναι $78\% \text{ N}_2$, $21\% \text{ O}_2$ και $1\% \text{ Ar}$, υπολογίστε τη γραμμομοριακή μάζα της ατμόσφαιρας. Συγκρίνετε αυτή την τιμή με την αντίστοιχη στην Αφροδίτη, η ατμόσφαιρα της οποίας είναι $96.5\% \text{ CO}_2$ και $3.5\% \text{ N}_2$.
- 1.18** Υπολογίστε τη μάζα σε μονάδες του SI ενός ατόμου Kr από τη γραμμομοριακή του μάζα.
- 1.19** Υπολογίστε τον γραμμομοριακό όγκο του $\text{Au}(s)$ σε θερμοκρασία δωματίου
- 1.20** Η πυκνότητα μάζας του Pt είναι 21.45 g cm^{-3} στους 298 K . Υπολογίστε την πυκνότητα αριθμού σε άτομα ανά κυβικό μέτρο στερεού Pt στους 298 K .

Περαιτέρω μελέτη

Όταν παραθέτω τις υποδείξεις της IUPAC, αυτό σημαίνει σιωπηρή αναφορά σε ένα από τα ακόλουθα τρία έργα. Πλήρης επιτομή όρων μπορεί να βρεθεί στη Χρυσή Βίβλο (Gold Book) και στην Πράσινη Βίβλο (Green Book), οι οποίες αναφέρονται παρακάτω. Αν θέλετε να διακρίνετε την ευτηκτοειδή αντίδραση από την ευτονική αντίδρασή, αυτές είναι οι αναφορές, όπου πρέπει να κοιτάξετε.

Gamsjäger, H., Lorimer, J.W., Scharlin, P., and Shaw, D.G. (2008) *Pure Appl. Chem.*, 80 (2), 233–276. Αυτή είναι μια αναφορά για όλες τις υποδείξεις της IUPAC και ορισμοί για όλα, από τον συντελεστή απορρόφησης έως τη μέθοδο υγρών υπολειμμάτων. International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) (1997) *Compendium of Chemical Terminology*, 2nd edition (η Χρυσή Βίβλος, the Gold Book), συντάχθηκε από A.D. McNaught, A. Wilkinson. Blackwell Science, Oxford. XML online διορθωμένη έκδοση: (2006–) δημιουργήθηκε από M. Nic, J. Jirat, B. Kosata; ενημερώσεις συντάχθηκαν από A. Jenkins.

Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry, IUPAC Green Book (Πράσινη Βίβλος) (2008) 3η έκδοση, 2η εκτύπωση, προετοιμάστηκε για δημοσίευση από E.R. Cohen, T. Cvitaš, J.G. Frey, B. Holmström, K. Kuchitsu, R. Marquardt, I. Mills, F. Pavese, M. Quack, J. Stohner, H.L. Strauss, M. Takami, A.J. Thor, IUPAC & RSC Publishing, Cambridge.

Εάν πρόκειται να προχωρήσετε πέρα από το να είστε φοιτητής που επιλέγει τη φυσικοχημεία και να γίνετε φοιτητής της φυσικοχημείας, τότε μετά την ολοκλήρωση αυτού του κειμένου πιθανότατα θέλετε να αγοράσετε ένα από αυτά τα παρακάτω δύο βιβλία.

Berry, R.S., Rice, S.A., and Ross, J. (2000) *Physical Chemistry*, 2nd edition. Oxford University Press, New York.

Metiu, H. (2006) *Physical Chemistry: Kinetics. Physical Chemistry: Quantum Mechanics. Physical Chemistry: Statistical Mechanics. Physical Chemistry: Thermodynamics* (4 volume set). Taylor & Francis, New York.

Για μια διασκεδαστική και ενημερωτική ιστορική αναδρομή για την ανάπτυξη της φυσικοχημείας, συνιστώ:

Coffey, P. (2008) *Cathedrals of Science: The Personalities and Rivalries That Made Modern Chemistry*. Oxford University Press, Oxford.

Quinn, S. (1996) *Marie Curie: A Life*. Simon & Schuster, New York.

Για κάπως στεγνότερη, σχολαστικότερη ιστορία του πεδίου:

Laidler, K.J. (1993) *The World of Physical Chemistry*. Oxford University Press, Oxford.

Περισσότερο επικεντρωμένα στην κβαντική θεωρία και στην ανάπτυξή της αλλά αρκετά ενδιαφέροντα είναι:

Jones, S. (2008) *The Quantum Ten: A Story of Passion, Tragedy, Ambition and Science*. Oxford University Press, Oxford.

Baggott, J. (2010) *The Quantum Story: A History in 40 Moments*. Oxford University Press, Oxford.

Αυτές οι ιστοσελίδες από το NIST είναι αρκετά χρήσιμες: NIST Chemistry Webbook NIST Chemistry Portal

NIST Reference on Constants, Units and Uncertainty

NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database \\\

Από τη Royal Society of Chemistry: Chem Spider