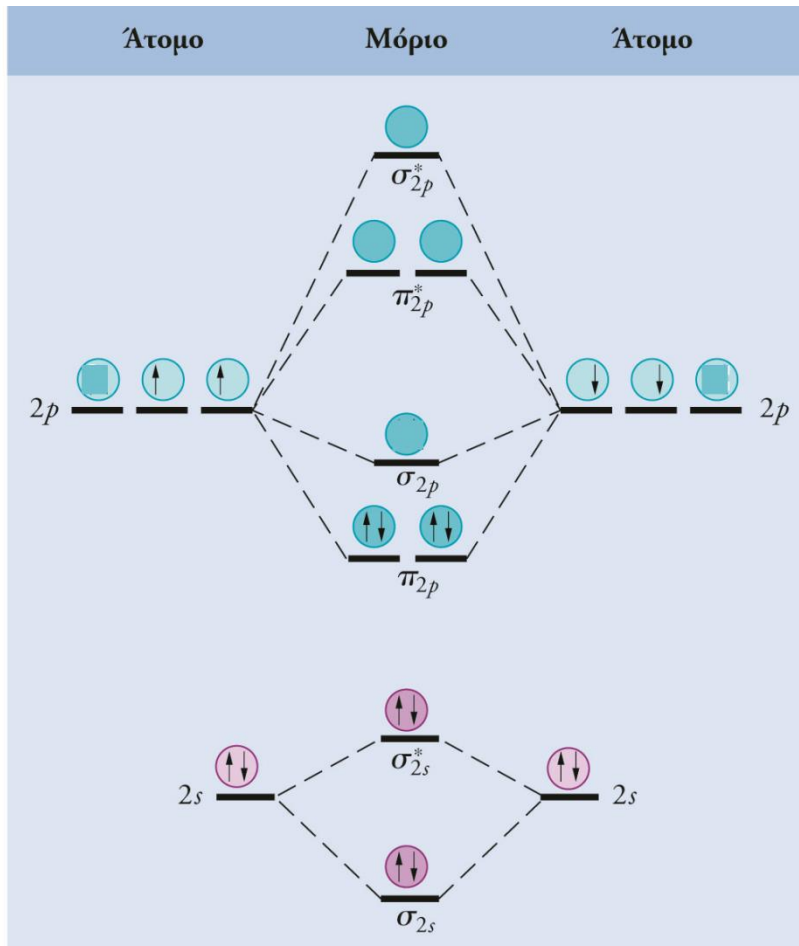


Άσκηση 10.9

Το μόριο C_2 ανιχνεύεται στη φάση ατμού πάνω από άνθρακα σε υψηλή θερμοκρασία. Περιγράψτε τη δομή των μοριακών τροχιακών αυτού του μορίου. Δηλαδή, (α) δώστε το διάγραμμα μοριακών τροχιακών και την ηλεκτρονική δομή. (β) Περιμένετε η μοριακή αυτή ουσία να είναι διαμαγνητική ή παραμαγνητική; (γ) Πόση είναι η τάξη δεσμού στο C_2 ;



ΜΟ του C_2

ΑΠΑΝΤΗΣΕΙΣ

(α) Υπάρχουν $2 \times 6 = 12$ ηλεκτρόνια στο C_2 εκ των οποίων τα 8 καταλαμβάνουν τα μοριακά τροχιακά του σύμφωνα με το διπλανό διάγραμμα και η ηλεκτρονική δομή του C_2 είναι:



(β) Δεν υπάρχουν ασύζευκτα ηλεκτρόνια και συνεπώς το C_2 είναι:

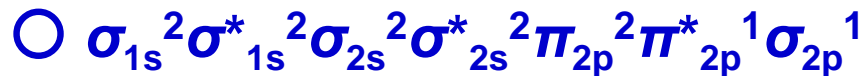
διαμαγνητικό

(γ) Η τάξη δεσμού του C_2 είναι:

$$\text{Τάξη δεσμού} = \frac{1}{2}(8 - 4) = 2$$

Άσκηση

Ποια από τις παρακάτω ηλεκτρονικές δομές είναι η σωστή για το ιόν C_2^{2-} ;



ΑΠΑΝΤΗΣΗ

Στο C_2^{2-} υπάρχουν $2 \times 6 + 2 = 14$ ηλεκτρόνια οπότε η ηλεκτρονική δομή του είναι:



Άσκηση

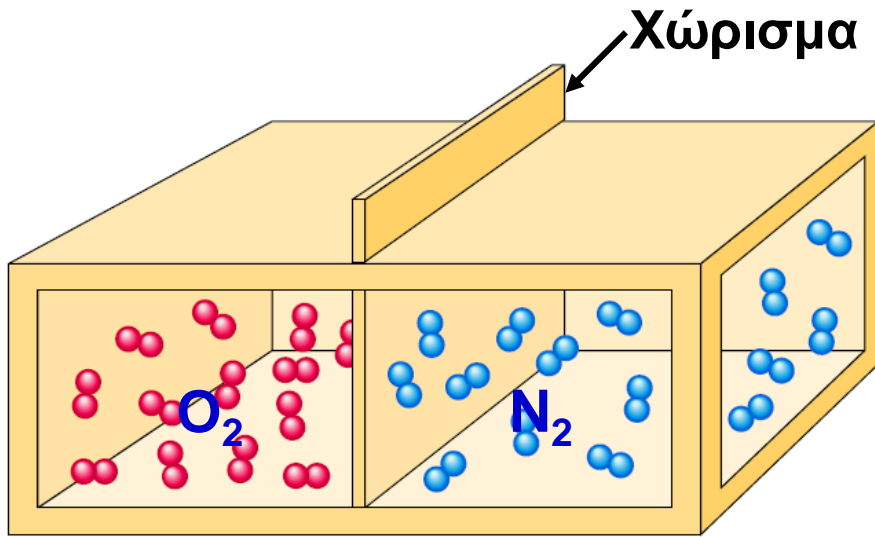
- (α) Δώστε ένα παράδειγμα υγρού διαλύματος παρασκευασμένου από διάλυση ενός αερίου σε υγρό.
- (β) Δώστε ένα παράδειγμα στερεού διαλύματος παρασκευασμένου από δύο στερεά.

ΑΠΑΝΤΗΣΗ

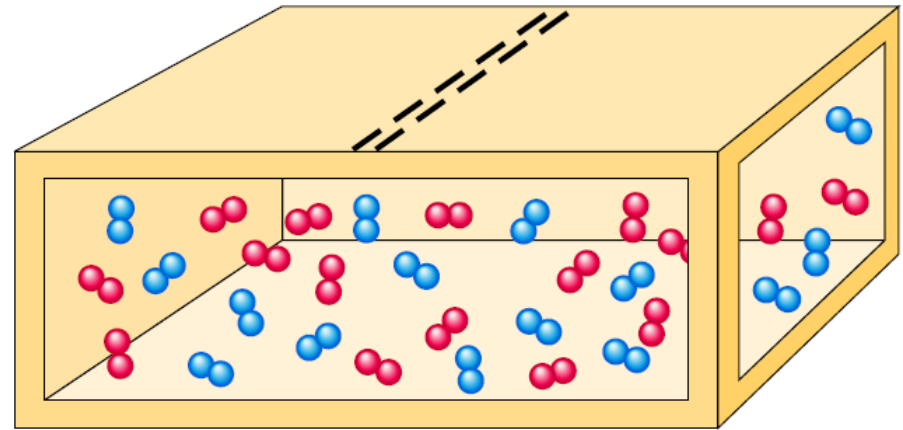
- (α) Αμμωνία σε νερό
- (β) Ψευδάργυρος σε χαλκό (ορείχαλκος)

Παράγοντες που εξηγούν τη διαλυτότητα

1. Η φυσική τάση των ουσιών να αναμιγνύονται μεταξύ τους



Ένα δοχείο διαιρείται με κινητό χώρισμα σε δύο μέρη, από τα οποία το αριστερό περιέχει αέριο οξυγόνο και το δεξιό αέριο άζωτο.



Όταν απομακρυνθεί το χώρισμα, τα μόρια των δύο αερίων αρχίζουν να αναμιγνύονται. Λόγω των τυχαίων κινήσεων που εκτελούν τα μόρια, η ανάμιξή τους στο τέλος είναι πλήρης.

Για επίτευξη **ισορροπίας** ανάμεσα σε φυσική τάση διαλύτη-διαλ. ουσίας να αναμιχθούν και τάση συστήματος για **χαμηλότερη δυνατή ενέργεια** λαμβάνονται υπόψη και:

2. Οι σχετικές ελκτικές δυνάμεις μεταξύ των χημικών οντοτήτων του διαλύματος

Είδη διαλυμάτων

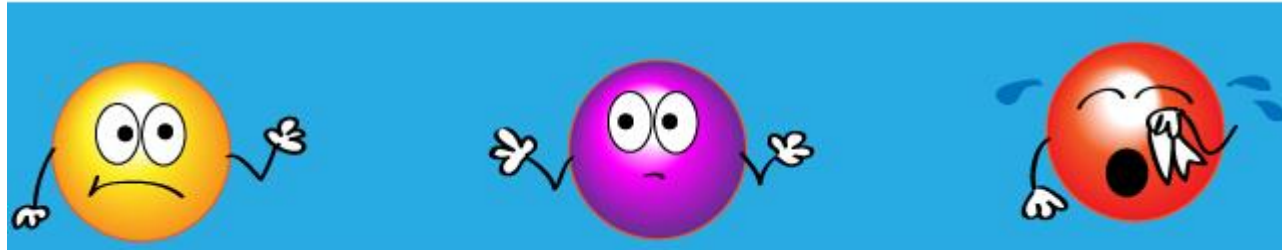
☞ Στα διαλύματα οι διαλυμένες ουσίες μπορούν να βρισκονται υπό μορφή:

(α) **Μορίων** (μοριακά διαλύματα, π.χ. ζάχαρη στο νερό)



Στα μοριακά διαλύματα τα «μόρια» δε διασπώνται

(β) **Ιόντων** (ιοντικά διαλύματα π.χ. NaCl στο νερό)



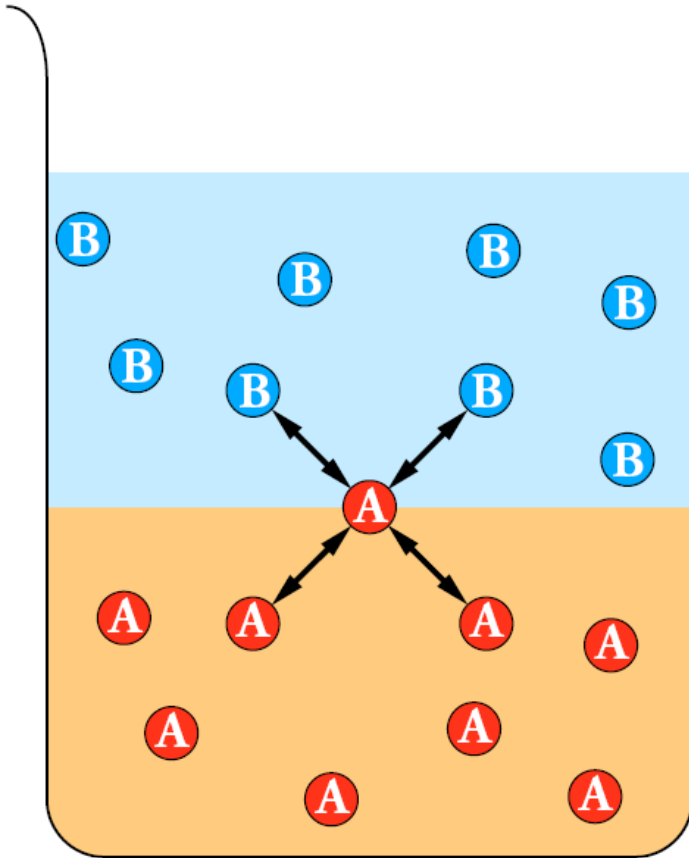
Στα ιοντικά διαλύματα τα «μόρια» διασπώνται προς ιόντα

(γ) **Μικυλλίων ή Συγκροτημάτων Μορίων**
(Κολλοειδή Διαλύματα, π.χ. άμυλο στο νερό)

Μοριακά διαλύματα

Αέρας: η απλούστερη περίπτωση μοριακού διαλύματος

Εξήγηση μη αναμιξιμότητας υγρών



Υποθέτουμε ότι ένα μόριο **A** κινείται από το υγρό **A** στο υγρό **B**. Αν η **διαμοριακή έλξη** μεταξύ δύο μορίων **A** είναι πολύ ισχυρότερη από τη διαμοριακή έλξη μεταξύ ενός μορίου **A** και ενός μορίου **B**, η καθαρή ελκτική δύναμη τείνει να τραβήξει το μόριο **A** πίσω στο υγρό **A**. Έτσι, το υγρό **A** δεν θα είναι αναμίξιμο με το υγρό **B**.

Τότε έχουμε και τη **χαμηλότερη ενέργεια** του συστήματος διαλ. ουσία- διαλύτης

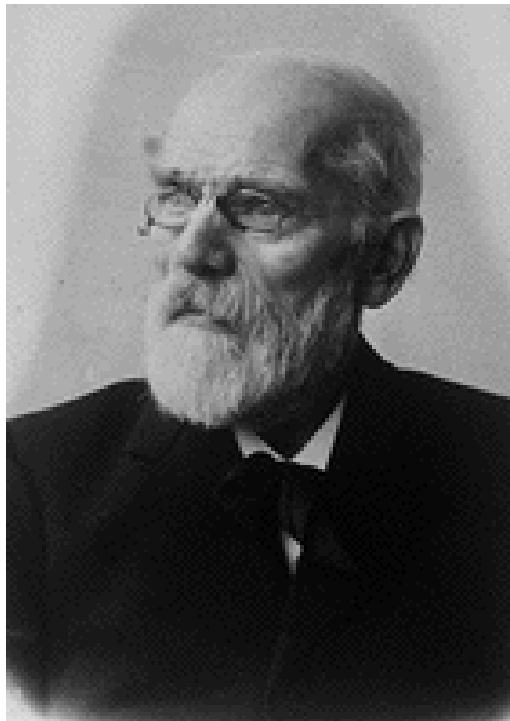
➔ *Similia similibus solvuntur* = όμοια ομοίσις διαλύονται
(Δηλαδή: Ουσίες με παρόμοιες διαμοριακές έλξεις είναι αμοιβαία διαλυτές)

ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΕΣ ΔΥΝΑΜΕΙΣ

Δυνάμεις αλληλεπίδρασης μεταξύ ουδετέρων μορίων, η ύπαρξη των οποίων διατυπώθηκε για πρώτη φορά το 1873 από τον **Van der Waals** (ελκτικές δυνάμεις μεταξύ μορίων αερίου)

Μεταξύ ουδετέρων μορίων υπάρχουν:

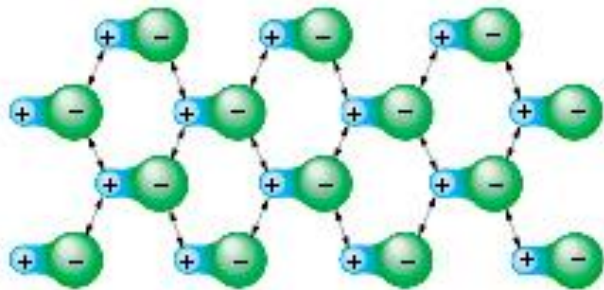
1. Δυνάμεις διπόλου-διπόλου
 2. Δυνάμεις London
 3. Δυνάμεις δεσμών υδρογόνου
- } Δυνάμεις
Van der Waals



Johannes van der Waals (1837-1923), Ολλανδός Φυσικός Ν.Ρ. Φυσικής 1910.

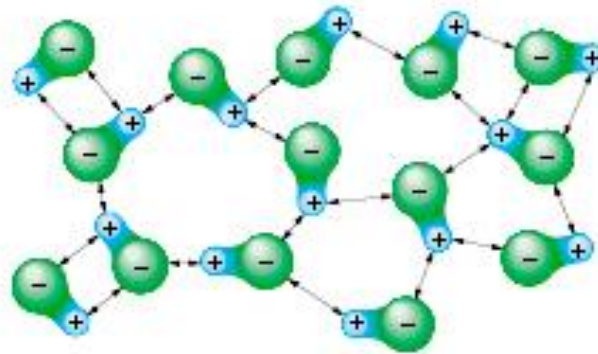
Τύπος αλληλεπίδρασης	Ενέργεια κατά προσέγγιση (kJ/mol)
<u>Διαμοριακός</u>	
Van der Waals	0,1 – 10
Δεσμός Υδρογόνου	10 – 40
<u>Χημικός δεσμός</u>	
Ιοντικός	100 – 1000
Ομοιοπολικός	100 – 1000

ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΕΣ ΔΥΝΑΜΕΙΣ



Στερεό

Τα μόρια τείνουν να ευθυγραμμιστούν στη στερεά κατάσταση έτσι ώστε τα θετικά άκρα να «βλέπουν» τα αρνητικά.



Υγρό

Η συνηθισμένη τυχαία κίνηση των μορίων στην υγρή κατάσταση εν μέρει μόνο καταστρέφει την ευθυγράμμιση αυτή των πολικών μορίων.

Η δύναμη διπόλου-διπόλου προκύπτει από τάση πολικών μορίων να ευθυγραμμίζονται «κατάλληλα»

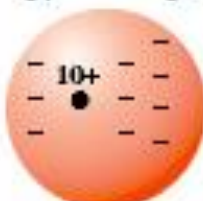
Ευθυγράμμιση των πολικών μορίων HCl

Σε κάποια στιγμή, υπάρχουν περισσότερα ηλεκτρόνια στη μια πλευρά του πυρήνα ενός ατόμου νέου από ό,τι στην άλλη.

Αν το άτομο αυτό βρεθεί κοντά σε ένα δεύτερο άτομο νέου, τότε τα ηλεκτρόνια του δεύτερου ατόμου αποκλίνουν. Το αποτέλεσμα είναι η δημιουργία δύο στιγμιαίων διπόλων και μια ελκτική δύναμη ανάμεσά τους.

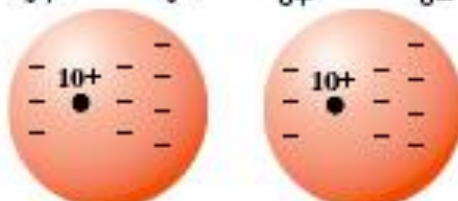
Αργότερα, η κίνηση των ηλεκτρονίων στα δύο άτομα έχει αλλάξει, αλλά αυτό γίνεται ταυτόχρονα στα δύο άτομα με αποτέλεσμα τη διατήρηση της ελκτικής δύναμης ανάμεσά τους.

$\delta+$ $\delta-$



Ne

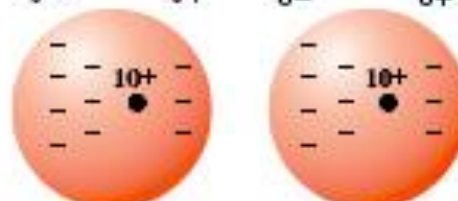
$\delta+$ $\delta-$ $\delta+$ $\delta-$



Ne

Ne

$\delta-$ $\delta+$ $\delta-$ $\delta+$



Ne

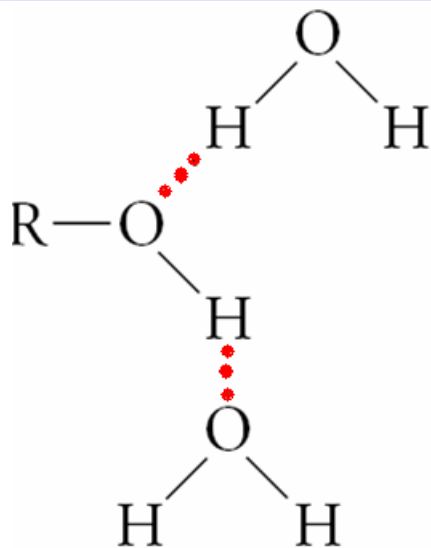
Ne

Οι δυνάμεις London ή δυνάμεις διασποράς προκύπτουν σε μη πολικά μόρια από μικρά στιγμιαία δίπολα δημιουργούμενα λόγω αλλαγής θέσεων των ηλεκτρονίων κατά την κίνησή τους γύρω από πυρήνα

Πρόελευση δυνάμεων London σε μόρια αερίου Ne

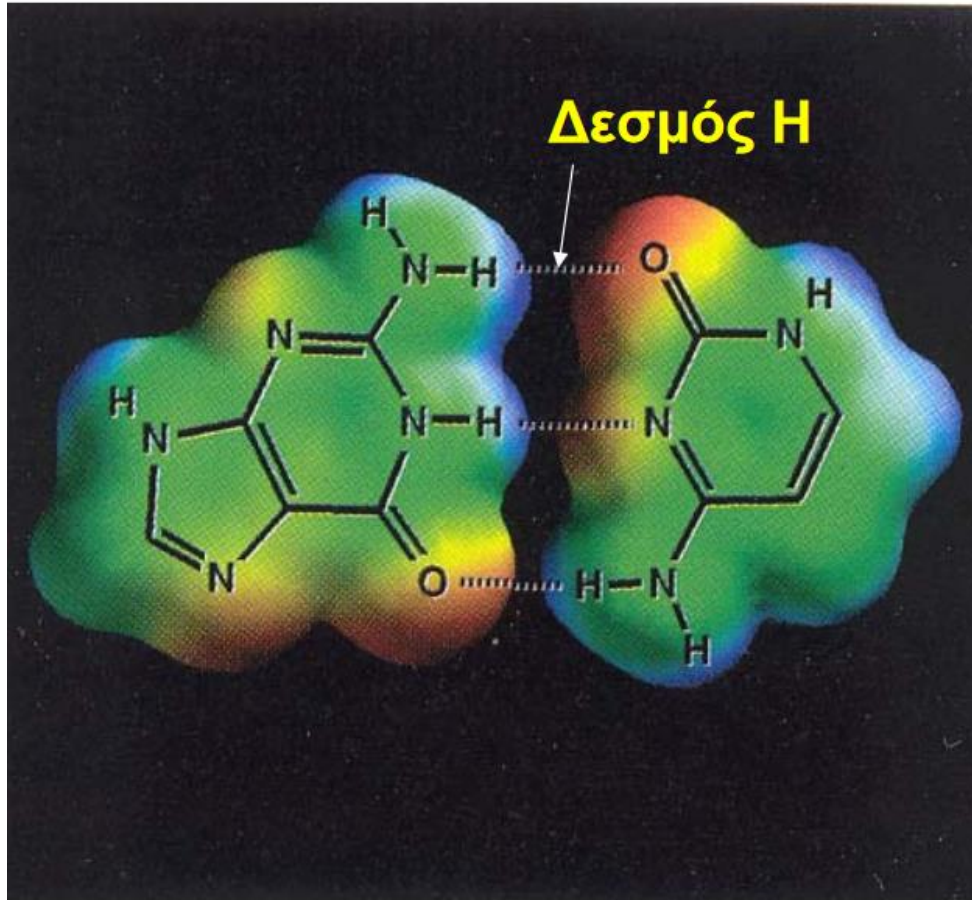
Διαλυτότητες των αλκοολών στο νερό

Όνομα	Τύπος	Διαλυτότητα σε H ₂ O (g/100 g H ₂ O, 20°C)
Μεθανόλη	CH ₃ OH	Αναμίξιμη
Αιθανόλη	CH ₃ CH ₂ OH	Αναμίξιμη
1-Προπανόλη	CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH	Αναμίξιμη
1-Βουτανόλη	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	7,9
1-Πεντανόλη	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	2,7
1-Εξανόλη	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	0,6



Νερό (H₂O) και αλκοόλες (ROH) έχουν κοινό γνώρισμα τις ομάδες -OH μέσω των οποίων σχηματίζονται ισχυροί δεσμοί υδρογόνου. «Μεγαλώνοντας» η R-, οι αλκοόλες χάνουν την ομοιότητα τους με το νερό...

Δεσμοί υδρογόνου μεταξύ δύο βιολογικά σημαντικών μορίων (γουανίνη και κυτοσίνη)



Μοντέλο φτιαγμένο από υπολογιστή που δείχνει τη σύνδεση μέσω δεσμών υδρογόνου δύο βιολογικά πολύ σημαντικών μορίων.

Πρόκειται για τη γουανίνη και την κυτοσίνη, δύο από τις τέσσερις βάσεις που χρησιμοποιούνται ως κώδικες στο DNA.

Ασκήσεις

Σύγκριση διαλυτοτήτων στο νερό και σε άλλους διαλύτες

12.2 Ποια από τις δύο ενώσεις C_4H_9OH και C_4H_9SH είναι πιθανό να διαλύεται περισσότερο στο νερό; Εξηγήστε:

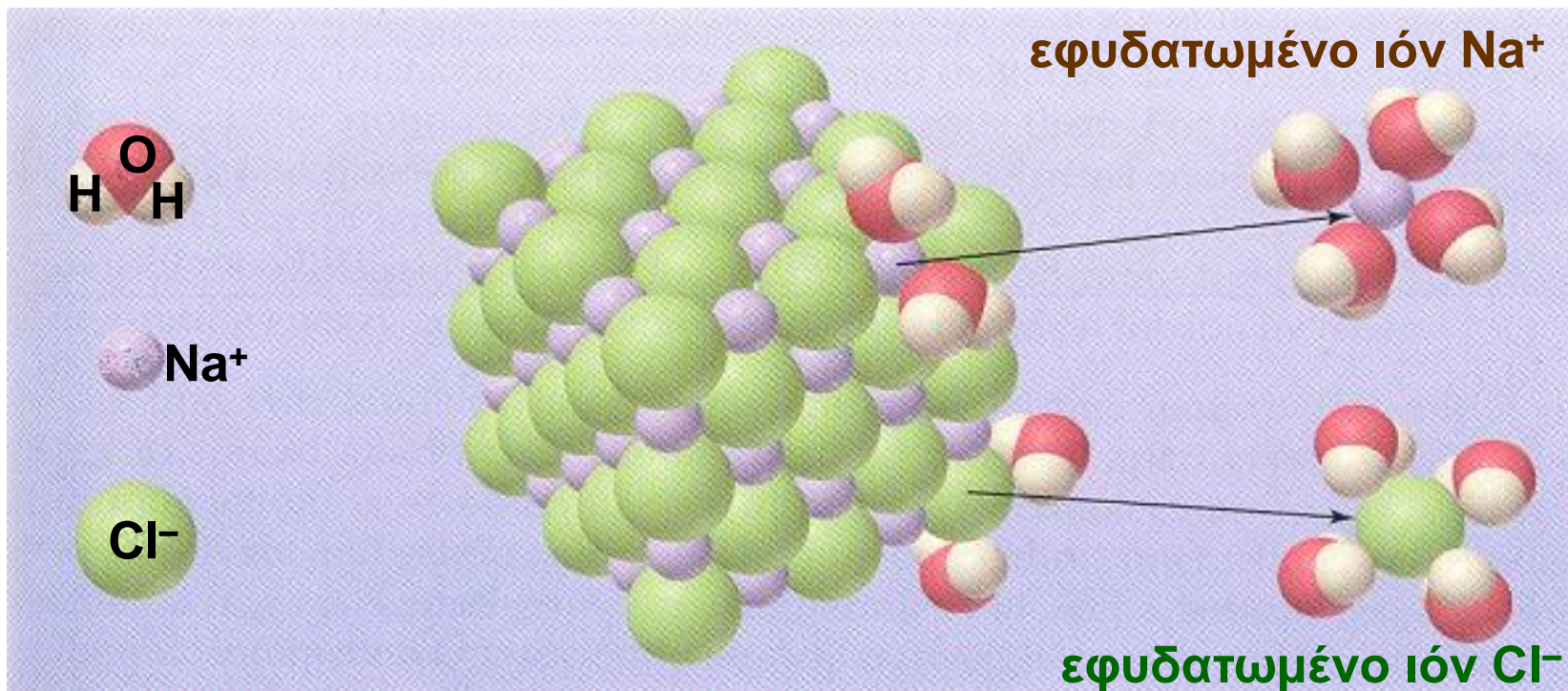
12.31 Πού είναι περισσότερο διαλυτό το βορικό οξύ, $B(OH)_3$, στην αιθανόλη C_2H_5OH , ή στο βενζόλιο C_6H_6 ; Εξηγήστε.

12.32 Πού διαλύεται περισσότερο το ναφθαλένιο, $C_{10}H_8$, στην αιθανόλη C_2H_5OH , ή στο βενζόλιο C_6H_6 ; Εξηγήστε.

12.33 Κατατάξετε τις ακόλουθες ενώσεις κατά σειρά αυξανόμενης διαλυτότητας σε εξάνιο, C_6H_{14} : CH_2OHCH_2OH , $C_{10}H_{22}$, H_2O .

Ιοντικά διαλύματα

Διαφορές στη διαλυτότητα ιοντικών ενώσεων στο νερό (π.χ. διαλυτότητα $\text{NaCl}=36,0$ ενώ $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 = 0,002$ g/100 mL) ερμηνεύονται βάσει διαφορετικών ελκτικών ενεργειών μεταξύ ιόντος-ιόντος στον κρύσταλλο και ιόντος-νερού.



Πώς διαλύεται κρύσταλλος NaCl σε νερό:

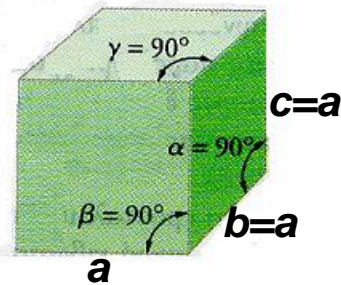
Ιόντα Na^+ και Cl^- που κατέχουν θέσεις στην επιφάνεια του κρυστάλλου είναι εκτεθειμένα σε μόρια νερού, τα οποία συγκρούονται με αυτά και τα **αποσπούν** από το στερεό NaCl .

Τα αποσπασμένα ιόντα Na^+ και Cl^- έλκονται από τα δίπολα μόρια H_2O , τα οποία τα περιβάλλουν δημιουργώντας έτσι εφυδατωμένα ιόντα (aq).

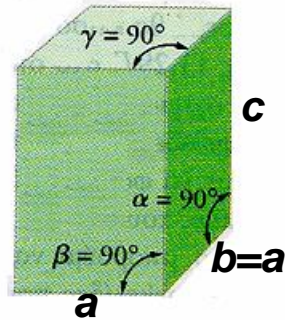
Πολλές ιοντικές ενώσεις είναι ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΣΤΕΡΕΑ

Μοναδιαία κυψελίδα: η μικρότερη κιβωτιοειδής μονάδα η οποία επαναλαμβάνόμενη σε τρεις διαστάσεις δημιουργεί τον κρύσταλλο.

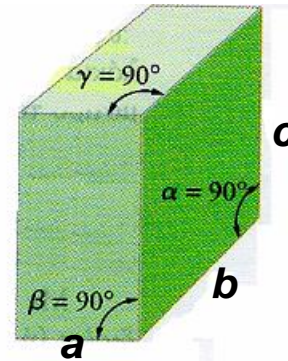
Έτσι, όλα τα κρυσταλλικά σώματα με βάση τις διαστάσεις (a, b, c) και τις γωνίες (α, β, γ) κατατάσσονται σε επτά κρυσταλλικά συστήματα



κυβικό



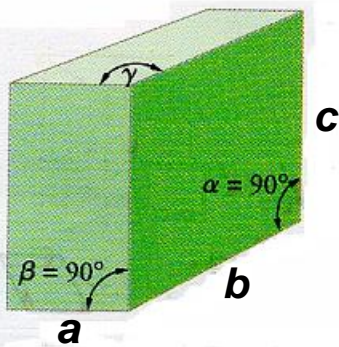
τετραγωνικό



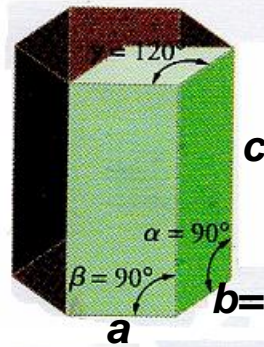
ορθορομβικό

Σχήματα μοναδιαίων κυψελίδων των διαφόρων κρυσταλλικών συστημάτων

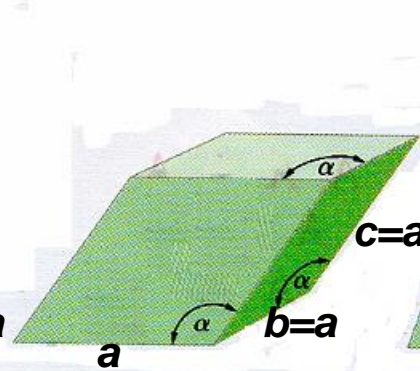
Μοναδιαίες κυψελίδες των 7 κρυσταλλικών συστημάτων και οι σχέσεις ανάμεσα στα μήκη των ακμών και τις γωνίες



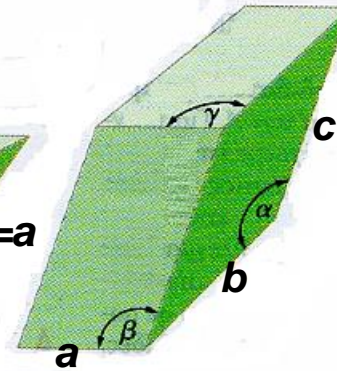
μονοκλινές



εξαγωνικό



ρομβοεδρικό

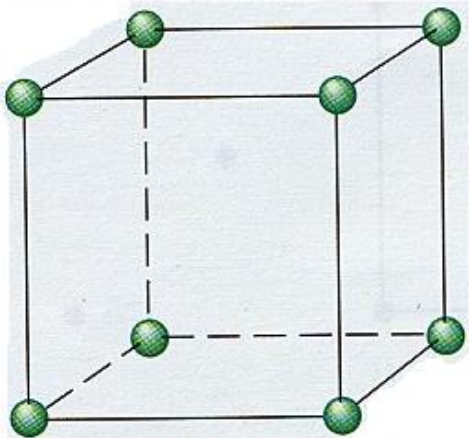


τρικλινές

Κυβικές μοναδιαίες κυψελίδες

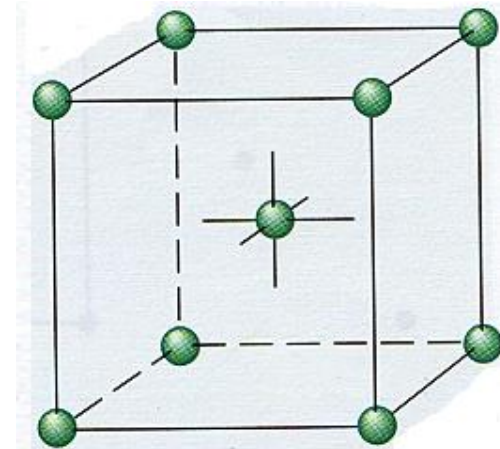
Σχεδόν και τα 7 κρυσταλλικά συστήματα έχουν περισσότερα από ένα πιθανά κρυσταλλικά πλέγματα (**14 κρυσταλλικά πλέγματα κατά Bravais**)

Για παράδειγμα το κυβικό σύστημα έχει τρία πιθανά πλέγματα:



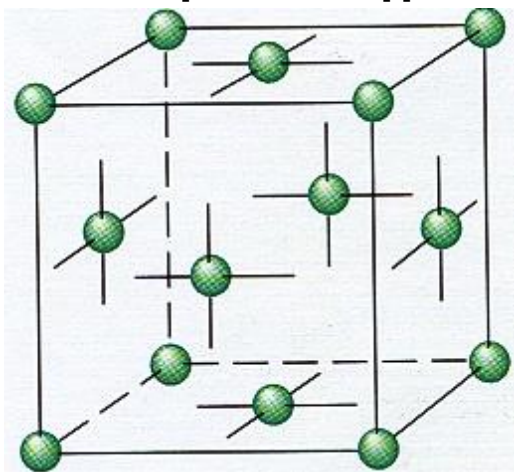
Απλό κυβικό πλέγμα

Απλό κυβικό πλέγμα: με πλεγματικά σημεία μόνο στις γωνίες της μοναδιαίας κυψελίδας



Ενδοκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (*bcc*)

Ενδοκεντρωμένο κυβικό πλέγμα: με ένα πλεγματικό σημείο στο κέντρο της μοναδιαίας κυψελίδας εκτός εκείνων στις γωνίες της

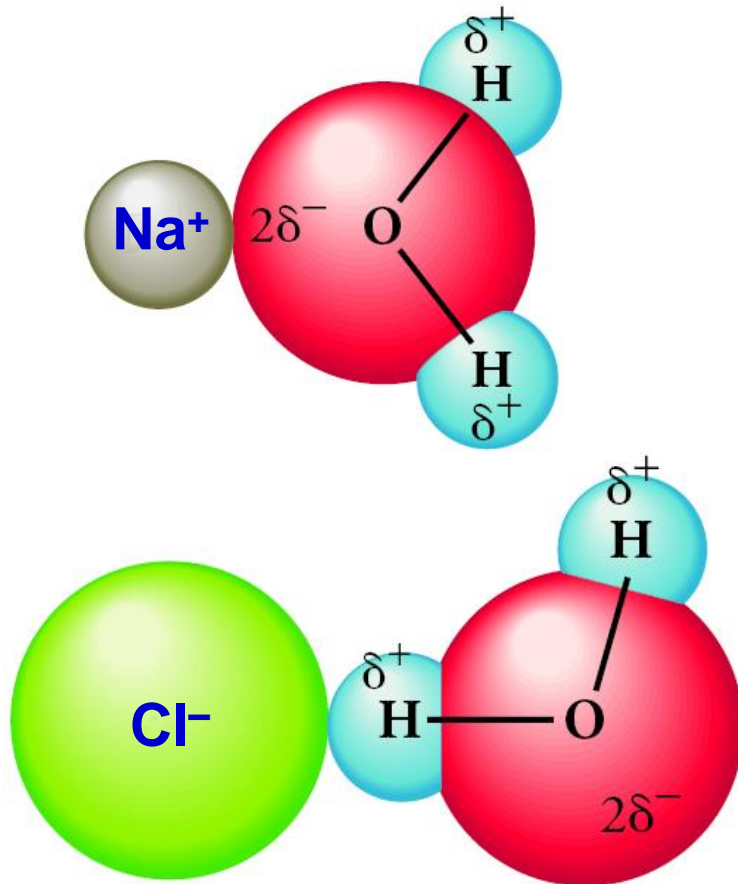


Ολοεδρικά κεντρωμένο κυβικό πλέγμα (*fcc*)

Ολοεδρικά κεντρωμένο κυβικό πλέγμα: με ένα πλεγματικό σημείο στο κέντρο κάθε έδρας της μοναδιαίας κυψελίδας εκτός εκείνων στις γωνίες της

Έλξη ιόντων από μόρια νερού λόγω δυνάμεων ιόντος-διπόλου (= υδάτωση)

Η άκρη O του μορίου H_2O προσανατολίζεται προς το κατιόν, ενώ ένα άτομο H προσανατολίζεται προς το ανιόν.



!!! Η διαλυτότητα ιοντικού στερεού στο νερό εξαρτάται από την **ενέργεια υδάτωσης** (έλξη μορίων H_2O από ιόντα) και την **ενέργεια πλέγματος** (ενέργεια συγκρατούσα τα ιόντα στο κρυσταλλικό πλέγμα)

Η **ενέργεια πλέγματος** δρα αντίθετα προς τη διαδικασία διάλυσης.

Η **ενέργεια υδάτωσης**, είναι το ποσόν θερμότητας, (ΔH), που απελευθερώνεται κατά την υδάτωση των ιόντων και (όπως και η ενέργεια πλέγματος), εξαρτάται από την **ακτίνα** το και το **φορτίο** των ιόντων \Rightarrow ενώσεις των Na^+ , K^+ ευδιάλυτες, ενώ των PO_4^{3-} δυσδιάλυτες!

Μεταβολές ενθαλπίας κατά τη διάλυση

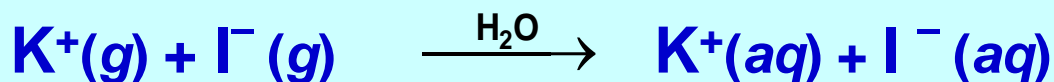
Ενθαλπία διαλύσεως είναι η μεταβολή της ενθαλπίας που συνοδεύει τη συνολική διαδικασία διαλύσεως μιας ουσίας σε ένα διαλύτη (και μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι το αλγεβρικό άθροισμα δύο ενεργειακών μεταβολών: της ενέργειας πλέγματος και της ενθαλπίας υδατώσεως)

Ενέργεια
πλέγματος



$$\Delta H = +632,2 \text{ kJ/mol}$$

Ενθαλπία
υδατώσεως



$$\Delta H = -627,0 \text{ kJ/mol}$$

Η πρόσθεση των δύο αντιδράσεων παριστάνει τη διάλυση του KI(s) και δίνει την **ενθαλπία διαλύσεως**

Ενθαλπία
διαλύσεως



$$\Delta H = +5,2 \text{ kJ/mol}$$

Ασκήσεις 12.3, 12.35, 12.36

Σύγκριση ενεργειών υδάτωσης

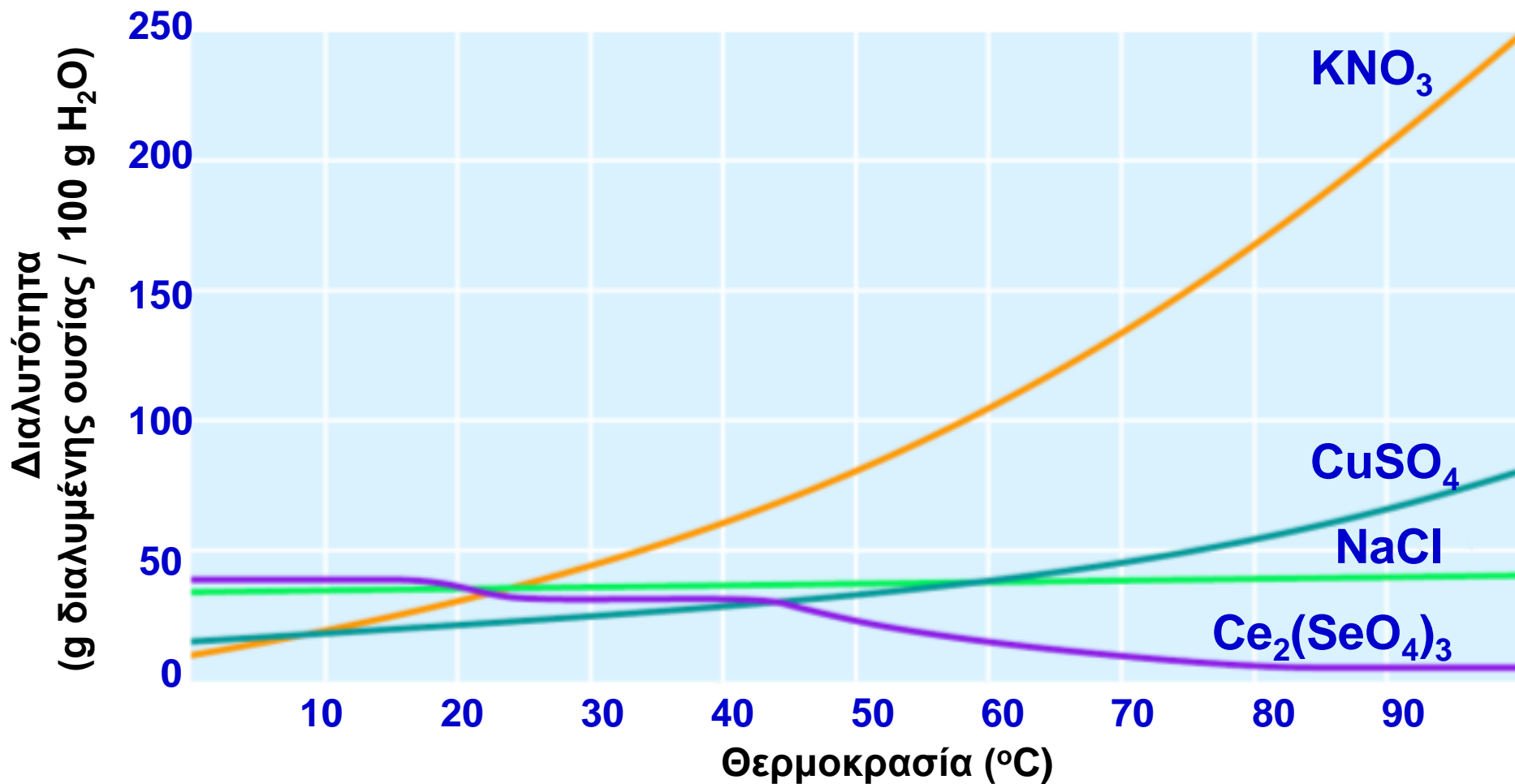
Ποιο ιόν έχει τη μεγαλύτερη ενέργεια υδάτωσης, το Na^+ ή το K^+ ;

Το ιόν Na^+ έχει μεγαλύτερη ενέργεια υδάτωσης από το K^+ , επειδή έχει μικρότερη ιοντική ακτίνα και συνεπώς πυκνότερο φορτίο και ισχυρότερο ηλεκτρικό πεδίο.

Ποιο από τα ακόλουθα ιόντα περιμένετε να έχει τη μεγαλύτερη ενέργεια υδάτωσης, το Mg^{2+} ή το Al^{3+} ;

Ποιο από τα ακόλουθα ιόντα περιμένετε να έχει τη μεγαλύτερη ενέργεια υδάτωσης, το F^- ή το Cl^- ;

Επίδραση της θερμοκρασίας πάνω στη διαλυτότητα ιοντικών ενώσεων



★ Με αύξηση της θερμοκρασίας, η διαλυτότητα πολλών ιοντικών ενώσεων μεγαλώνει (KNO₃), μερικών μένει σχεδόν αμετάβλητη (NaCl) και κάποιων ελαττώνεται [Ce₂(SeO₄)₃]

Όταν ιοντικές ενώσεις διαλύονται στο νερό μπορεί να απορροφάται ή να εκλύεται θερμότητα



Στιγμιαίο ψυχρό επίθεμα

Εσωτερικό σακίδιο με NH_4NO_3 .

Εξωτερικό σακίδιο με νερό.

Σπάσιμο εσωτερικού σακιδίου \Rightarrow

διαδικασία διάλυσης **ενδόθερμη**

(απορρόφηση θερμότητας \Rightarrow

ψύξη)



Στιγμιαίο θερμό επίθεμα

Εσωτερικό σακίδιο με CaCl_2 .

Εξωτερικό σακίδιο με νερό.

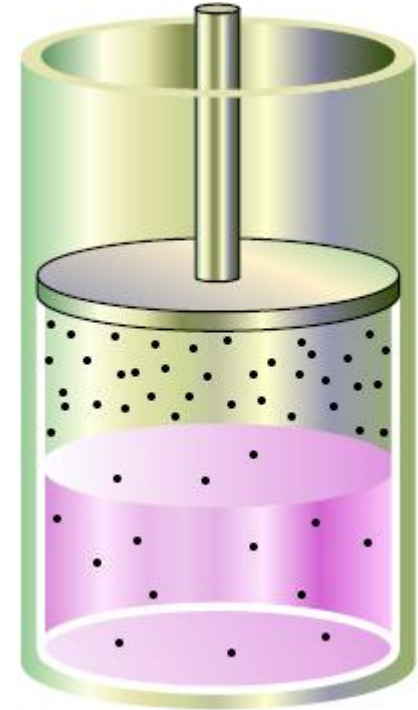
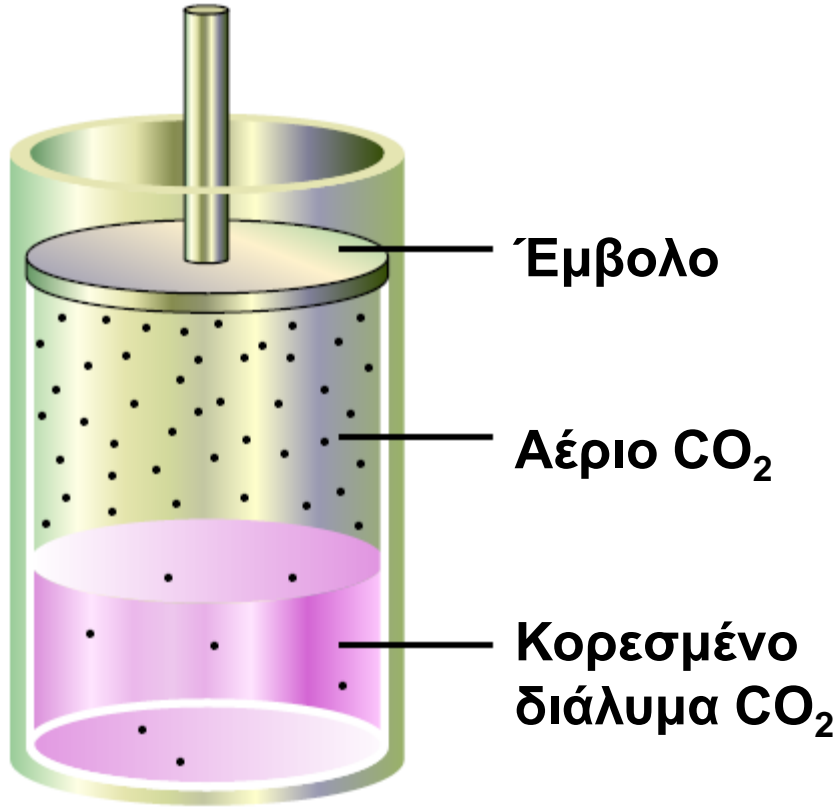
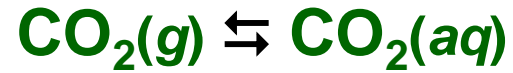
Σπάσιμο εσωτερικού σακιδίου \Rightarrow

διαδικασία διάλυσης **εξώθερμη**

(έκλυση θερμότητας \Rightarrow θέρμανση)

Επίδραση της πίεσης πάνω στη διαλυτότητα

Αρχή του Le Chatelier



✓ Επίδραση της πίεσης πάνω στη διαλυτότητα αερίου

Όταν το έμβολο ωθείται προς τα κάτω, αυξάνοντας τη μερική πίεση του διοξειδίου του άνθρακα, διαλύεται περισσότερο αέριο (γεγονός που τείνει να ελαττώσει τη μερική πίεση του CO_2).

Επίδραση της πίεσης πάνω στη διαλυτότητα



Ένα αεριούχο ποτό παράγεται διαλύοντας σε αυτό διοξείδιο του άνθρακα υπό πίεση.

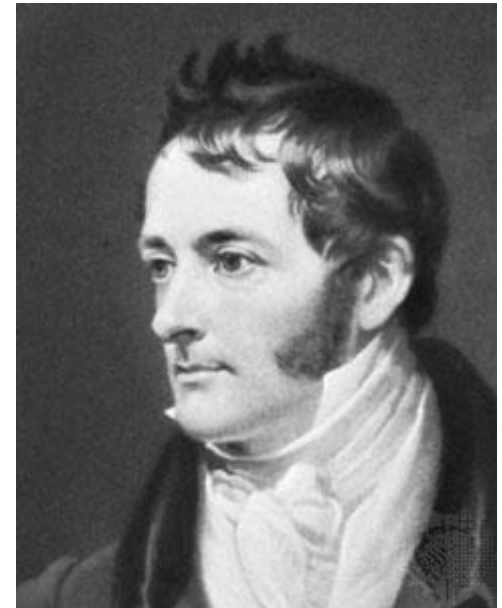
Σε υψηλότερες πιέσεις διαλύεται περισσότερο διοξείδιο του άνθρακα από κάθε άλλο τρόπο.

Όταν η πίεση ελαττωθεί απότομα, το διοξείδιο του άνθρακα γίνεται λιγότερο διαλυτό και η περίσσεια του εκφεύγει από το διάλυμα προκαλώντας αφρισμό.

Απότομη ελάττωση της πίεσης αεριούχου ποτού

Ισχύει: **Νόμος του Henry: $S = k_H P$**

Όπου: **S** = διαλυτότητα του αερίου σε g/L ,
 P = μερική πίεση του αερίου και **k_H** = σταθερά



William Henry (1775- 1836)
Άγγλος χημικός

Άσκηση 12.4

Εφαρμογή του νόμου του Henry

Ένα λίτρο νερού στους 25°C διαλύει 0,0404 g O₂ όταν η μερική πίεση του οξυγόνου είναι 1,00 atm. Πόση είναι η διαλυτότητα του οξυγόνου του αέρα στον οποίο η μερική πίεση του O₂ είναι 159 mmHg;

Γράφουμε το νόμο του Henry ($S = K_H P$) για τις δύο πιέσεις και στη συνέχεια διαιρούμε κατά μέλη: $S_1 = K_H P_1$ $S_2 = K_H P_2$ \Rightarrow

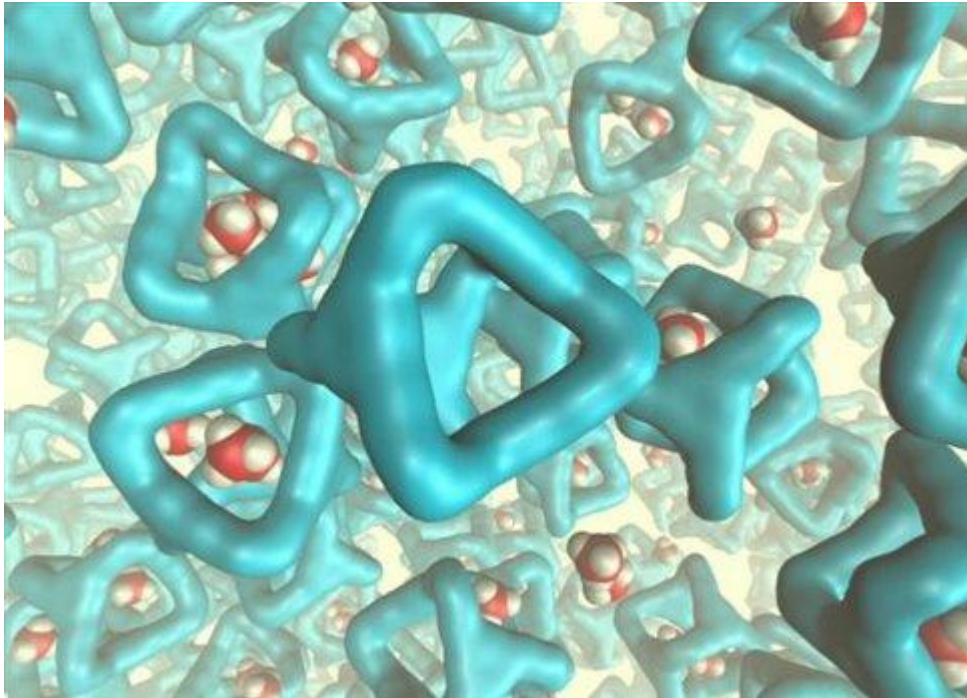
$$\frac{S_2}{S_1} = \frac{k_H P_2}{k_H P_1} = \frac{P_2}{P_1}$$

$$S_2 = \frac{P_2 S_1}{P_1} = \frac{(159 \text{ mmHg})(0,0404 \text{ g O}_2 / \text{L})}{760 \text{ mmHg}}$$

$$= 0,008452 \text{ g} = 0,00845 \text{ g O}_2 / \text{L}$$

Το πρώτο «πορώδες υγρό»

Τα υλικά που περιέχουν μόνιμους **πόρους** (πορώδη), είναι πολύτιμα από τεχνολογική άποψη και μέχρι πρόσφατα, ήταν όλα **στερεά**.

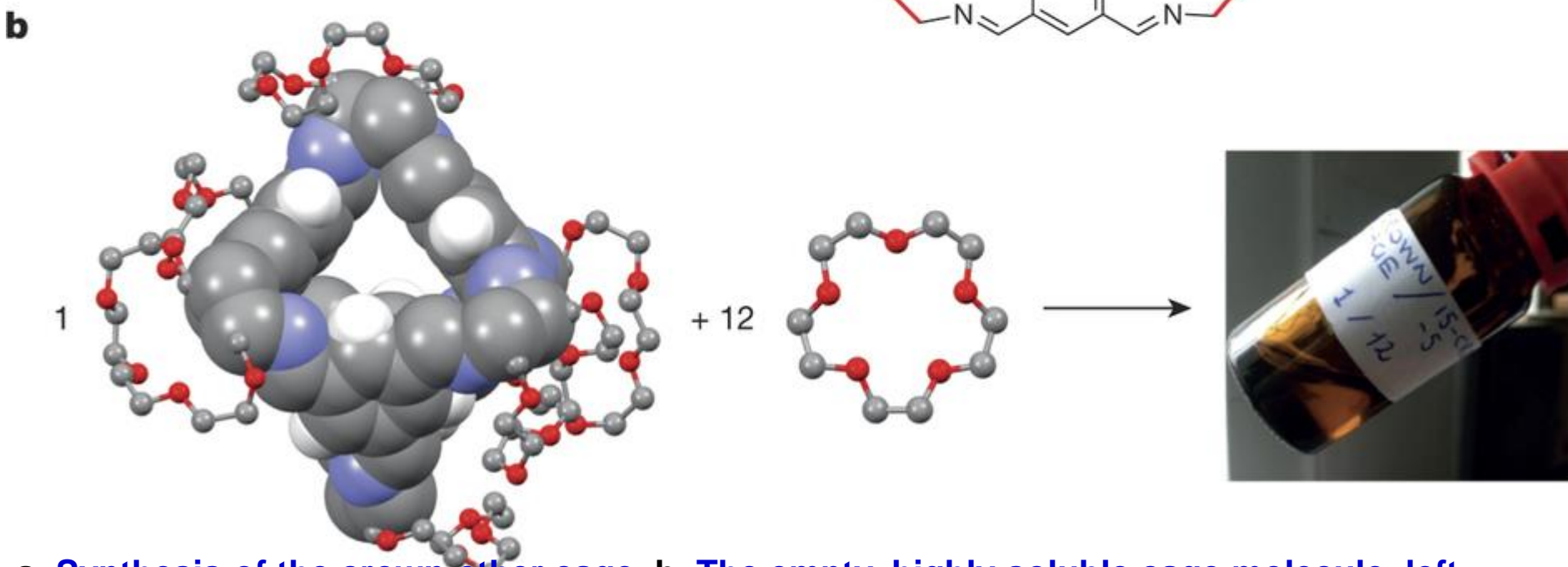
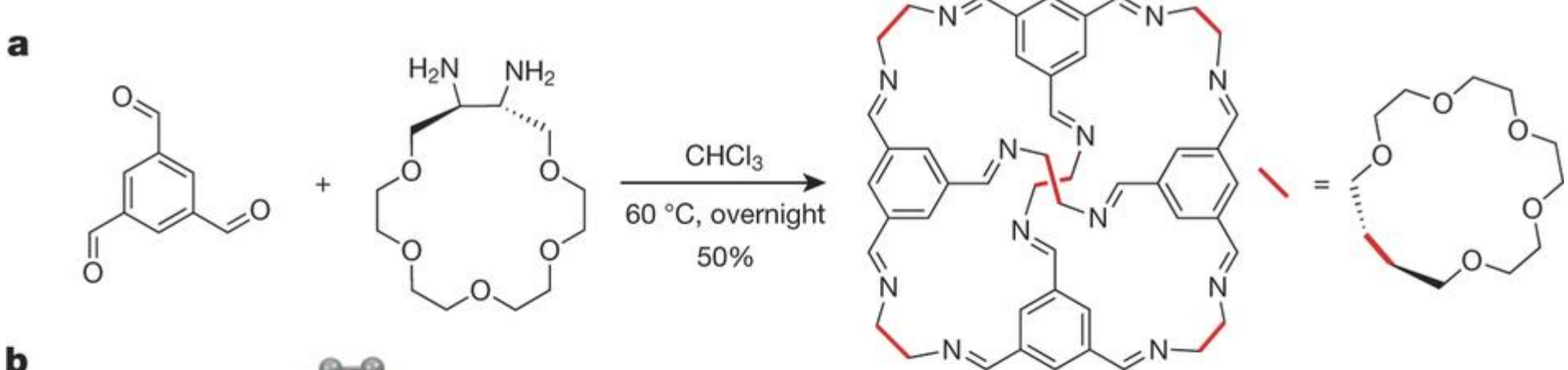


Τα μόρια από τα οποία αποτελείται το υγρό είναι σχεδιασμένα να αφήνουν χώρο ανάμεσά τους (**Queen's University, Μπέλφαστ, περιοδικό Nature, 11/2015**)

Σχεδιάστηκε (σχήματα των μορίων) στον υπολογιστή και **παρασκευάστηκε ειδικό υγρό** από το μηδέν ώστε αυτό να μην καταλαμβάνει όλο το χώρο. Λόγω των άδειων οπών, διαπιστώθηκε ότι το υγρό μπορεί να **διαλύει** ασυνήθιστα μεγάλες ποσότητες αερίων.

Αξιοποίηση:

1. Αποθήκευση **καύσιμου υδρογόνου**
2. Κατακράτηση και αποθήκευση **CO₂** από ρυπογόνες βιομηχανίες.



a, Synthesis of the crown-ether cage. b, The empty, highly soluble cage molecule, left, defines the pore space; the 15-crown-5 solvent, middle, provides fluidity but cannot enter the cage cavities. The concentrated solution (porous liquid) flows at room temperature, right. Key: C, grey; O, red; N, blue; H, white. Space-filling rendering highlights the core of the cage. Ball and stick rendering represents the crown-ether substituents on the cage and the 15-crown-5 solvent. All H atoms except those attached to aromatic rings of the cage compound have been omitted for clarity.

Συγκέντρωση διαλύματος

Συγκέντρωση διαλύματος: η ποσότητα της ουσίας που έχει διαλυθεί σε δεδομένη ποσότητα διαλύτη ή διαλύματος.

Συμβολίζεται γενικά με το σύμβολο **C** ή γράφοντας τον μοριακό τύπο της διαλυμένης ουσίας ανάμεσα σε αγκύλες, π.χ. $[\text{NH}_3]$ ή $[\text{H}_2\text{SO}_4]$.

Αραιό διάλυμα: όταν η συγκέντρωση της διαλυμένης ουσίας είναι χαμηλή

Πυκνό διάλυμα: όταν η συγκέντρωση της διαλυμένης ουσίας είναι υψηλή.

Η ποσότητα της **διαλυμένης ουσίας** μπορεί να εκφράζεται σε γραμμάρια ή moles.

Η ποσότητα του **διαλύτη** ή του **διαλύματος** μπορεί να αναφέρεται σε όγκο ή μάζα.

⇒ δημιουργούνται διάφοροι τρόποι έκφρασης της συγκέντρωσης ενός διαλύματος.

Τρόποι έκφρασης της συγκέντρωσης

Χημικές μονάδες

1. Molarity ή γραμμομοριακή συγκέντρωση (M)
$$\text{Molarity } (M) = \frac{\text{moles διαλυμένης ουσίας}}{\text{λίτρα διαλύματος}}$$
2. Normality ή κανονική συγκ. ή κανονικότητα, $N =$
$$\frac{\text{γραμμοϊσοδυναμοδιαλυμένης ουσίας}}{\text{λίτρα διαλύματος}}$$
3. Molality ή γραμμομοριακή συγκέντρωση κατά 1000 g διαλύτη (m)
$$\text{Molality } (m) = \frac{\text{moles διαλυμένης ουσίας}}{\text{χιλιόγραμμα διαλύτη}}$$
4. Γραμμομοριακό κλάσμα (X)
$$X_A = \frac{\text{moles συστατικού } A}{\text{συνολικός αριθμός moles διαλύματος}}$$

Φυσικές μονάδες

1. Επί τοις εκατό κατά μάζα ($\% m/m$)
$$= \frac{\text{μάζα διαλυμένης ουσίας}}{\text{μάζα διαλύματος}} \times 100\%$$
2. Επί τοις εκατό κατά μάζα προς όγκο ($\% m/V$)
$$= \frac{\text{μάζα διαλυμένης ουσίας}}{\text{όγκος διαλύματος}} \times 100\%$$
3. Επί τοις εκατό κατ' όγκο ($\% V/V$)
$$= \frac{\text{όγκος διαλυμένης ουσίας}}{\text{όγκος διαλύματος}} \times 100\%$$
4. Μέρη ανά εκατομμύριο (ppm)
$$C_{\text{ppm}} = \frac{\text{μάζα διαλυμένης ουσίας}}{\text{μάζα διαλύματος}} \times 10^6 \text{ ppm}$$

Molarity ή γραμμομοριακή συγκέντρωση

Molarity ή γραμμομοριακή συγκέντρωση (M) είναι τα moles της διαλυμένης ουσίας σε ένα λίτρο διαλύματος.

$$\text{Molarity } (M) = \frac{\text{moles διαλυμένης ουσίας}}{\text{λίτρα διαλύματος}}$$

Ένα υδατικό διάλυμα που είναι $0,30 M$ σε αμμωνία (NH_3) περιέχει $0,30 \text{ mol NH}_3$ ($5,1 \text{ g NH}_3$) ανά λίτρο διαλύματος.

Παρασκευή διαλύματος ορισμένης γραμμομοριακής συγκέντρωσης

Παράδειγμα 1

Πόσα γραμμάρια πενταϋδρικού θειικού χαλκού(II), πρέπει να ζυγίσουμε, προκειμένου να παρασκευάσουμε 250 mL διαλύματος πενταϋδρικού θειικού χαλκού(II) συγκέντρωσης 0,200 M;

5,85 g

12,48 g

12,5 g

5,847 g

ΛΥΣΗ

Συγκέντρωση 0,200 M σημαίνει 0,200 mol ουσίας σε 1 L ή 1000 mL διαλύματος.

Άρα, για 250 mL διαλύματος, θα χρειασθούμε $(0,200 \text{ mol} \times 250 \text{ mL}) / 1000 \text{ mL} = 0,0500 \text{ mol CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$.

Επειδή 1 mol $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ζυγίζει 249,686 g, τα 0,0500 mol ζυγίζουν 12,48 ή 12,5 g $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

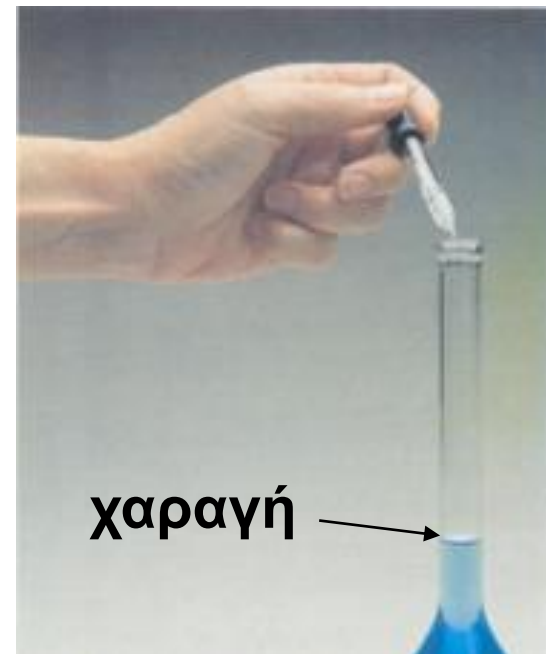
Τρόπος παρασκευής διαλύματος CuSO_4 συγκέντρωσης $0,200 \text{ M}$



Ζυγίζουμε $12,48 \text{ g}$ $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ($0,0500 \text{ mol}$) πάνω στο δίσκο του εργαστηριακού ζυγού



Μεταφέρουμε προσεκτικά τον πενταϋδρικό θειικό χαλκό(II) σε ογκομετρική φιάλη των 250 mL



Προσθέτουμε νερό μέχρις ότου η στάθμη του διαλύματος φθάσει στη χαραγή της ογκομετρικής φιάλης

Υπολογισμός της molarity από μάζα ουσίας και όγκο διαλύματος

Παράδειγμα 2

Σε μια ογκομετρική φιάλη των 50,0 mL εισάγουμε 0,42 g νιτρικού νατρίου. Προσθέτουμε στη φιάλη νερό, ανακινούμε για να διαλυθεί το στερεό νιτρικό νάτριο και συμπληρώνουμε με νερό μέχρι τη χαραγή της φιάλης. Πόση είναι η molarity του διαλύματος που προκύπτει;

0,099 M

0,20 M

0,2 M

0,0988 M

Για να υπολογίσουμε τη molarity χρειαζόμαστε τα moles της διαλυμένης ουσίας. Γι' αυτό στην αρχή μετατρέπουμε τα γραμμάρια του NaNO_3 σε moles:

Επειδή 1 mol NaNO_3 ζυγίζει 84,9945 g, τα 0,42 g αντιστοιχούν σε $4,94149 \times 10^{-3}$ moles NaNO_3

Η molarity ισούται με τα moles της διαλυμένης ουσίας διαιρεμένα με τον όγκο του διαλύματος σε λίτρα δηλαδή: **0,099 M**

Normality ή Κανονική Συγκέντρωση ή Κανονικότητα

Normality (N) είναι τα γραμμοϊσοδύναμα της διαλυμένης ουσίας σε ένα λίτρο διαλύματος.

$$\text{Normality (N)} = \frac{\text{γραμμοϊσοδύναμα διαλυμένης ουσίας}}{\text{λίτρα διαλύματος}}$$

Στην πράξη χρησιμοποιούμε και τα χιλιοστο-γραμμοϊσοδύναμα (meq) ανά χιλιοστόλιτρο (mL).

Ορισμός γραμμοϊσοδυναμίου:

$$\text{eq} = \frac{\text{mole διαλυμένης ουσίας}}{n}$$

n = καθαρός αριθμός

Η τιμή του n εξαρτάται από τον τύπο της αντίδρασης!!!

⇒ δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε τη normality, αν δεν γνωρίζουμε σε ποια αντίδραση θα χρησιμοποιηθεί το διάλυμα.

Το γραμμοϊσοδύναμο σε μεταθετικές αντιδράσεις

Οξύ: $n =$ αριθμός των H^+ που παρέχονται κατά την αντίδραση



$$1 \text{ eq } H_3PO_4 = \frac{1 \text{ mol } H_3PO_4}{1} = \frac{98,00 \text{ g}}{1} = 98,00 \text{ g } H_3PO_4$$



$$1 \text{ eq } H_3PO_4 = \frac{1 \text{ mol } H_3PO_4}{2} = \frac{98,00 \text{ g}}{2} = 49,00 \text{ g } H_3PO_4$$



$$1 \text{ eq } H_3PO_4 = \frac{1 \text{ mol } H_3PO_4}{3} = \frac{98,00 \text{ g}}{3} = 32,67 \text{ g } H_3PO_4$$

Το γραμμοϊσοδύναμο σε οξειδοαναγωγικές αντιδράσεις

Οξειδωτική ουσία: n = αριθμός των προσλαμβανομένων ηλεκτρονίων κατά την αντίδραση

$$1 \text{ eq KMnO}_4 = \frac{1 \text{ mol KMnO}_4}{5} = 31,61 \text{ g}$$



$$1 \text{ eq KMnO}_4 = \frac{1 \text{ mol KMnO}_4}{3} = 52,68 \text{ g}$$



Αναγωγική ουσία: n = αριθμός των αποβαλομένων ηλεκτρονίων κατά την αντίδραση

$$1 \text{ eq H}_2\text{S} = \frac{1 \text{ mol H}_2\text{S}}{2} = 17,04 \text{ g}$$



Molality

Molality (m) είναι τα moles της διαλυμένης ουσίας ανά χιλιόγραμμο διαλύτη.

$$\text{Molality } (m) = \frac{\text{moles διαλυμένης ουσίας}}{\text{χιλιόγραμμο διαλύτη}}$$

Π.χ. ένα διάλυμα που προκύπτει με διάλυση 0,30 mol αιθυλενογλυκόλης σε 2,0 kg νερού έχει molality $0,30 \text{ mol} / 2,0 \text{ kg} = 0,15 \text{ m}$ αιθυλενογλυκόλη

! molality: ανεξάρτητη από τη θερμοκρασία.

Υπολογισμός της molality από μάζα ουσίας και μάζα διαλύτη

Παράδειγμα

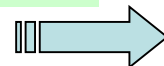
Πόση είναι η molality ενός διαλύματος που παρασκευάστηκε με διάλυση 225 mg γλυκόζης ($C_6H_{12}O_6$) σε 5,00 mL αιθυλικής αλκοόλης ($d = 0,789 \text{ g/mL}$);

Η molality αναφέρεται σε moles διαλυμένης ουσίας ανά kg διαλύτη.

Θα πρέπει λοιπόν να μετατρέψουμε τα 225 mg γλυκόζης σε moles γλυκόζης και τα mL της αλκοόλης σε kg αλκοόλης.

1 mol $C_6H_{12}O_6$ ζυγίζει 180,2 g \Rightarrow τα 225 mg = 0,225 g είναι

$$\text{moles } C_6H_{12}O_6 = \frac{0,225 \text{ g}}{180,2 \text{ g / mol}} = 1,25 \times 10^{-3} \text{ mol}$$



Υπολογισμός της molality από μάζα ουσίας και μάζα διαλύτη

Η μάζα του διαλύτη βρίσκεται, αν πολλαπλασιάσουμε τον όγκο επί την πυκνότητα:

$$\text{μάζα διαλύτη} = (5,00 \text{ mL})(0,789 \text{ g/mL}) = 3,95 \text{ g} = 0,00395 \text{ kg} \Rightarrow$$

$$\text{Molality} = \frac{1,25 \times 10^{-3} \text{ mol C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}{0,00395 \text{ kg διαλύτη}} = 0,316 \text{ m C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$$

Γραμμομοριακό κλάσμα

Γραμμομοριακό κλάσμα (X) ενός συστατικού A του διαλύματος είναι τα moles του συστατικού A διαιρεμένα δια του συνολικού αριθμού των moles του διαλύματος (δηλαδή, moles υπολοίπων συστατικών και διαλύτη).

$$X_A = \frac{\text{moles συστατικού } A}{\text{συνολικός αριθμός moles διαλύματος}}$$

Π.χ., σε ένα διάλυμα που παρασκευάσθηκε από 1 mol αιθυλενογλυκόλης και 9 mol νερού, το γραμμομοριακό κλάσμα της αιθυλενογλυκόλης είναι $1/10 = 0,1$ και το γραμμομοριακό κλάσμα του νερού είναι $9/10 = 0,9$.

Υπολογισμός των γραμμομοριακών κλασμάτων συστατικών διαλύματος

Παράδειγμα

Υπολογίστε τα γραμμομοριακά κλάσματα της γλυκόζης ($C_6H_{12}O_6$) και του νερού σε ένα διάλυμα που περιέχει 6,32 g γλυκόζης διαλυμένα σε 27,3 g νερού.

$6,58 \times 10^{-2}$
 $2,73 \times 10^{-1}$

$2,26 \times 10^{-2}$
 $9,77 \times 10^{-1}$

0,023
0,98

0,066
0,273

ΛΥΣΗ

Επειδή τα γραμμομοριακά κλάσματα αναφέρονται σε moles, θα μετατρέψουμε τις δεδομένες μάζες σε moles.

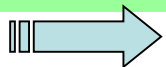
1 mol $C_6H_{12}O_6$ ζυγίζει 180,2 g

⇒ τα 6,32 g είναι:

$$\text{moles } C_6H_{12}O_6 = \frac{6,32 \text{ g}}{180,2 \text{ g / mol}} = 0,0351 \text{ mol}$$

Τα moles του νερού στο διάλυμα είναι:

$$\text{moles } H_2O = \frac{27,3 \text{ g}}{18,0 \text{ g / mol}} = 1,52 \text{ mol}$$



Υπολογισμός των γραμμομοριακών κλασμάτων συστατικών διαλύματος

Συνεπώς, το σύνολο των moles του διαλύματος είναι
 $0,0351 \text{ mol} + 1,52 \text{ mol} = 1,555 \text{ mol} \Rightarrow$

$$\text{Γραμμομοριακό κλάσμα γλυκόζης} = \frac{0,0351 \text{ mol}}{1,555 \text{ mol}} = 0,0226$$

$$\text{Γραμμομοριακό κλάσμα νερού} = \frac{1,52 \text{ mol}}{1,555 \text{ mol}} = 0,977$$

★ Το άθροισμα των γραμμομοριακών κλασμάτων είναι 1,00

Συγκέντρωση επί τοις % κατά μάζα

Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα (% *m/m*) είναι ο λόγος της μάζας της διαλυμένης ουσίας (σε g) προς τη μάζα του διαλύματος (σε g), πολλαπλασιασμένος επί 100%.

$$\text{Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα} = \frac{\text{μάζα διαλυμένης ουσίας}}{\text{μάζα διαλύματος}} \times 100\%$$

Π.χ., ένα υδατικό διάλυμα χλωριδίου του νατρίου, NaCl, 4,2% κατά μάζα περιέχει 4,2 g NaCl σε 100 g διαλύματος.

Παρασκευή διαλύματος ορισμένης συγκέντρωσης επί τοις % κατά μάζα

Παράδειγμα

Πώς θα παρασκευάσετε 360 g υδατικού διαλύματος, το οποίο να περιέχει 2,50% κατά μάζα οξικό νάτριο, CH_3COONa ;

Η μάζα του οξικού νατρίου στα 360 g διαλύματος είναι

$$\text{Μάζα } \text{CH}_3\text{COONa} = 360 \text{ g} \times 0,0250 = 9,00 \text{ g}$$

Η ποσότητα νερού στο διάλυμα είναι

$$\begin{aligned} \text{Μάζα } \text{H}_2\text{O} &= \text{μάζα διαλύματος} - \text{μάζα } \text{CH}_3\text{COONa} = 360 \text{ g} - 9,00 \text{ g} \\ &= 351 \text{ g} \end{aligned}$$

Θα παρασκευάσουμε το διάλυμα διαλύοντας 9,00 g οξικού νατρίου σε 351 g νερού.

Συγκέντρωση επί τοις % κατά μάζα προς όγκο

Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα προς όγκο (% *m/V*) είναι ο λόγος της μάζας της διαλυμένης ουσίας (σε g) προς τον όγκο του διαλύματος (σε mL), πολλαπλασιασμένος επί 100%.

$$\text{Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατ' όγκο} = \frac{\text{μάζα διαλυμένης ουσίας}}{\text{όγκος διαλύματος}} \times 100\%$$

Π.χ., ένα υδατικό διάλυμα χλωριδίου του νατρίου, NaCl, 3,6 % κατ' όγκο περιέχει 3,6 g NaCl σε 100 mL διαλύματος.

Παρασκευή διαλύματος ορισμένης συγκέντρωσης επί τοις % κατά μάζα προς όγκο

Παράδειγμα

Πώς θα παρασκευάσετε 250 mL υδατικού διαλύματος K_2SO_4 , συγκέντρωσης 2,8% κατά μάζα προς όγκο;

Συγκέντρωση 2,8% (m/V) σημαίνει 2,8 g K_2SO_4 σε 100 mL διαλύματος. Άρα, για 250 mL διαλύματος, θα χρειασθούμε $(2,8 \text{ g} \times 250 \text{ mL}) / 100 \text{ mL} = 7,0 \text{ g } K_2SO_4$.

Σε μια ογκομετρική φιάλη των 250 mL εισάγουμε 7,0 g K_2SO_4 . Προσθέτουμε στη φιάλη νερό, ανακινούμε για να διαλυθεί το στερεό K_2SO_4 και συμπληρώνουμε με νερό μέχρι τη χαραγή της φιάλης. Το διάλυμα που παρασκευάσαμε έχει πράγματι συγκέντρωση (m/V)

$$\frac{7,0 \text{ g}}{250 \text{ mL}} \times 100\% = 2,8\%$$

Συγκέντρωση επί τοις % κατ' όγκο

Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατ' όγκο (% V/V) είναι ο λόγος του όγκου της διαλυμένης ουσίας (σε mL) προς τον όγκο του διαλύματος (σε mL), πολλαπλασιασμένος επί 100%.

$$\text{Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατ' όγκο} = \frac{\text{όγκος διαλυμένης ουσίας}}{\text{όγκος διαλύματος}} \times 100\%$$

Π.χ., ένα υδατικό διάλυμα μεθανόλης 8,5% κατ' όγκο περιέχει 8,5 mL μεθανόλης στα 100 mL διαλύματος.

Το διάλυμα αυτό παρασκευάζεται με εισαγωγή 8,5 mL μεθανόλης σε ογκομετρική φιάλη των 100 mL και συμπλήρωση με νερό μέχρι τη χαραγή της φιάλης.

Τι σημαίνει συγκέντρωση υδροχλωρικού οξέος 37%;

!!! Όταν η συγκέντρωση εκφράζεται επί τοις εκατό, πρέπει να καθορίζεται αν αυτή είναι επί τοις εκατό κατά μάζα, κατ' όγκο ή κατά μάζα προς όγκο.

Εφόσον αυτό δεν αναφέρεται, θεωρούμε ότι πρόκειται για:

* Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα προς όγκο (m/V), αν η διαλυμένη ουσία είναι στερεή.

* Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατ' όγκο (V/V), αν η διαλυμένη ουσία είναι υγρή.

* Συγκέντρωση επί τοις εκατό κατά μάζα (m/m), για διαλυμένα στο νερό αέρια, (όπως τα: NH_3 και HCl).

⇒ $\text{HCl}(aq)$ 37% σημαίνει κατά μάζα

Μέρη ανά εκατομμύριο (ppm)

Η συγκέντρωση σε μέρη ανά εκατομμύριο (C_{ppm}) ορίζεται από τη σχέση:

$$C_{ppm} = \frac{\text{μάζα διαλυμένης ουσίας}}{\text{μάζα διαλύματος}} \times 10^6 \text{ ppm}$$

Π.χ., ένα υδατικό διάλυμα με συγκέντρωση ιόντων χλωριδίου (Cl^-) 7 ppm, περιέχει:

7 g ιόντων Cl^- σε 10^6 g διαλύματος ή
7 mg ιόντων Cl^- σε 1000 g διαλύματος.

Επειδή η πυκνότητα ενός τέτοιου αραιού διαλύματος είναι πρακτικά η πυκνότητα του καθαρού νερού ($d = 1,00 \text{ g/mL}$ ή 1000 g/L), μπορούμε να πούμε ότι η συγκέντρωση των 7 ppm αντιστοιχεί σε 7 mg ιόντων Cl^- ανά λίτρο διαλύματος.

★ **Ανάλογα ορίζεται η συγκέντρωση σε μέρη ανά δισεκατομμύριο (ppb).**

Υπολογισμός της συγκέντρωσης σε ppm από τη μάζα της διαλυμένης ουσίας

Παράδειγμα

Σε κάποια κράτη, το ανώτατο επιτρεπόμενο όριο νιτρικών ιόντων στο πόσιμο νερό είναι 40 mg ανά λίτρο νερού. Εκφράστε αυτό το όριο σε ppm.

Η πυκνότητα του νερού, μαζί με τα ίχνη των διαλυμένων ουσιών, θεωρείται πρακτικά ίση με 1,00 g/mL, οπότε ένα λίτρο νερού έχει μάζα 1000 g

⇒ το επιτρεπτό όριο των νιτρικών δίνεται από τη σχέση

$$\frac{40 \text{ mg NO}_3^-}{1000 \text{ g νερού}}$$



Υπολογισμός της συγκέντρωσης σε ppm από τη μάζα της διαλυμένης ουσίας

Επειδή οι μονάδες μάζας πρέπει να είναι ίδιες, μετατρέπουμε τα 40 mg σε γραμμάρια (0,040 g) και έχουμε

$$c_{\text{ppm}} = \frac{0,040 \text{ g NO}_3^-}{1000 \text{ g}} \times 10^6 \text{ ppm} = 40 \text{ ppm NO}_3^-$$