

3. ВЕЛИЧИНИ, ЕДИНИЦИ И СИМБОЛИ ВО ХЕМИЈАТА

Глигор Јовановски, Бојан Шоптрајанов

Институт за хемија, Природно-математички факултет, Универзитет „Св. Кирил и Методиј“,
91000 Скопје, Македонија

Во претходниот број од *Гласникот* [1] беа дадени табели за интернационално препорачаните називи, симболи, дефиниции и SI единици за физичките величини од областа на ОПШТАТА ХЕМИЈА и МОЛЕКУЛАРНИТЕ И СРОДНИ НАУКИ.

Во овој број се презентирани називите, симболите, дефинициите и SI единиците за физички-

те величини од областа на ХЕМИСКАТА ТЕРМОДИНАМИКА и ХЕМИСКАТА КИНЕТИКА. Во подолу дадените табели се внесени и соодветните податоци за некои величини што досега не биле предмет на разгледување во *Гласникот*, а се потребни при дефинирањето на величини од хемиската термодинамика и хемиската кинетика.

3.3. ХЕМИСКА ТЕРМОДИНАМИКА

Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Топлина	q, Q		J
Работа	w, W		J
Сила	\vec{F}	$\vec{F} = m\vec{a}$	N
Притисок	p, P	$p = F/A$	Pa, N·m ⁻²
Брзина	v, u, c		m·s ⁻¹
Забрзување	\vec{a}	$\vec{a} = dv/dt$	m·s ⁻²
Енергија	E		J
Потенцијална енергија	E_p		J
Кинетичка енергија	E_k	$E_k = \frac{1}{2}mv^2$	J
Внатрешна енергија	U	$\Delta U = q + w$	J
Енталпија	H	$H = U + pV$	J
Плоштина	A, A_s		m ²
Волумен	V		m ³
Термодинамичка температура	T		K
Целзиусова [Celsius] температура	θ, t	$\theta/^{\circ}\text{C} = T / \text{K} - 273.15$	°C
Ентропија	S	$dS \geq dq / T$	J·K ⁻¹

Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Хелмхолцова [Helmholtz] енергија	A	$A = U - TS$	J
Гибсова [Gibbs] енергија	G	$G = H - TS$	J
Површински напон	σ, γ	$\sigma = (\partial G / \partial A_s)_{T,p}$	$J \cdot m^{-2}$ $N \cdot m^{-1}$
Моларна величина X^1	X_m	$X_m = X/n$	$[X] \cdot mol^{-1}$
Специфична величина X^1	x	$x = X/m$	$[X] \cdot kg^{-1}$
Топлински капацитет при константен притисок	C_p	$C_p = (\partial H / \partial T)_p$	$J \cdot K^{-1}$
при константен волумен	C_v	$C_v = (\partial U / \partial T)_v$	$J \cdot K^{-1}$
Однос на топлинските капацитети	γ	$\gamma = C_p / C_v$	1
Џаул [Joule]-Томсонов [Thomson] коефициент	μ, μ_{JT}	$\mu = (\partial T / \partial p)_H$	$K \cdot Pa^{-1}$
Фактор на компресибилноста	Z	$Z = pV_m / RT$	1
Хемиски потенцијал	μ	$\mu_B = (\partial G / \partial n_B)_{T,p,n_{j \neq B}}$	$J \cdot mol^{-1}$
Апсолутен активитет	λ	$\lambda_B = \exp(\mu_B / RT)$	1
Стандарден хемиски потенцијал ²	μ^\ominus, μ^\ominus		$J \cdot mol^{-1}$
Стандардна реакциона Гибсова енергија ^{2,3,4}	$\Delta_r G^\ominus$	$\Delta_r G^\ominus = \sum_B \nu_B \mu_B^\ominus$	$J \cdot mol^{-1}$
Афинитет на реакцијата ^{2,3,4}	A	$A = -(\partial G / \partial \xi)_{p,T}$ $= -\sum_B \nu_B \mu_B$	
Стандардна реакциона енталпија ^{2,3,4}	$\Delta_r H^\ominus$	$\Delta_r H^\ominus = \sum_B \nu_B H_B^\ominus$	$J \cdot mol^{-1}$
Стандардна реакциона ентропија ^{2,3,4}	$\Delta_r S^\ominus$	$\Delta_r S^\ominus = \sum_B \nu_B S_B^\ominus$	$J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$
Константа на рамнотежата	K^\ominus, K	$K^\ominus = \exp(-\Delta_r G^\ominus / RT)$	1
Константа на рамнотежата изразена преку парцијални притисоци	K_p	$K_p = \prod_B p_B^{\nu_B}$	$Pa^{\sum \nu}$
концентрации	K_c	$K_c = \prod_B c_B^{\nu_B}$	$(mol \cdot m^{-3})^{\sum \nu}$
Фугацитет	f	$f_B = \lambda_B \lim_{p \rightarrow 0} (p_B / \lambda_B)_T$	Pa
Коефициент на фугацитет	ϕ	$\phi_B = f_B / p_B$	1

Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Активитет и коефициент на активитетот засновани на Рауловиот [Raoult] закон			
активитет ⁵	a	$a_B = \exp\left[\frac{\mu_B - \mu_B^*}{RT}\right]$	1
коефициент на активитетот	f	$f_B = a_B/x_B$	1
Активитет и коефициент на активитетот засновани на Хенриевитот [Henry] закон⁶			
активитет изразен преку:			
молалност	a_b	$a_{b,B} = \exp\left[\frac{\mu_B - \mu_{B^\ominus}}{RT}\right]$	1
концентрација	a_c	$a_{c,B} = \exp\left[\frac{\mu_B - \mu_{B^\ominus}}{RT}\right]$	1
молски удел	a_x	$a_{x,B} = \exp\left[\frac{\mu_B - \mu_{B^e}}{RT}\right]$	1
коефициент на активитетот заснован на:			
молалност	γ_b	$\gamma_{b,B} = a_{b,B} b_{B^\ominus}^\ominus / b_B$	1
концентрација	γ_c	$\gamma_{c,B} = a_{c,B} c_{B^\ominus}^\ominus / c$	1
молски удел	γ_x	$\gamma_{x,B} = a_{x,B} / x_B$	1
Јонска сила на раствор изразена преку:			
молалности	I_b	$I_c = \left(\sum b_B z_B^2\right) / 2$	$\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$
концентрации	I_c	$I_c = \left(\sum c_B z_B^2\right) / 2$	$\text{mol} \cdot \text{kg}^{-3}$
Осмотски притисок ⁷	Π	$\Pi = c_B RT$	Pa

1. Дефиницијата се однесува на чиста супстанца, меѓутоа може да се применува и за смеса. Величината X е екстензивна, а единиците за X_m , односно x зависат од тоа за која величина X станува збор. Со $[X]$ е означена единицата за екстензивната величина X .

Пример: Моларниот волумен на супстанцата B е дефиниран како $V_m(B) = V/n(B)$, а единиците се $\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, додека специфичниот волумен на супстанцата B е дефиниран како $v(B) = V/m(B)$, а единиците се $\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}$.

2. При употреба на стандардни величини, стандардната состојба треба да биде дефинирана. Според препораките на IUPAC:

Стандарден притисок, $p^\ominus = 10^5 \text{ Pa} (= 1 \text{ bar})$

Стандардна молалност, $b^\ominus = 1 \text{ mol} \cdot \text{kg}^{-1}$

Стандардна концентрација, $c^\ominus = 1 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$

Може да се употребуваат и други p^\ominus , b^\ominus и c^\ominus вредности, но тие треба да се специфицираат.

3. Симболот γ претставува општ симбол за реакција, којшто во специјален случај може да биде заменет и со друг симбол.

Пример: $\Delta_f H^\ominus$ означува стандардна моларна енталпија на формирање, односно образување (f од formation).

Друга често употребувана ознака од овој тип е индексот c што означува реакција на согорување (c од combustion).

Слични ознаки се употребуваат и во други случаи, за процеси што не се хемиски реакции, на пример, var за процесот на испарување (vaporisation), sub за процесот на сублимација (sublimation), fus за процесот на топење (fusion), sol за процесот на растворање (solution), dil за процесот на разредување (dilution) итн.

4. Реакцијата на која се однесува ова величина треба да биде специфицирана и запишана во видот $0 = \sum \nu(B_i)B_i$, каде што стехио-

метрискиот коефициент $\nu(B_i)$ е негативен ако B_i е реактант, а позитивен ако B_i е продукт на реакцијата.

5. Во дефиниционата равенка μ_B^* го означува хемискиот потенцијал на чистата супстанца B. Алтернативна дефиниција за активитетот (релативниот активитет) на супстанцата B е

$$a_B = \lambda_B / \lambda_B^\ominus$$

каде што стандардниот апсолутен активитет е даден со

$$\lambda_B^\ominus = \exp(\mu_B^\ominus / RT).$$

6. Стандардниот хемиски потенцијал μ^\ominus е различно дефиниран во трите посочени случаја (активитет изразен преку молалноста, преку концентрацијата, односно преку молскиот удел на супстанцата B).

7. Дефиницијата се однесува за идеален разреден раствор.

3.4. ХЕМИСКА КИНЕТИКА

Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Брзина на промена на величината X^1	\dot{X}	$\dot{X} = dX/dt$	$[X] \cdot s^{-1}$
Брзина на конверзијата ²	$\dot{\xi}$	$\dot{\xi} = d\xi/dt$	$mol \cdot s^{-1}$
Брзина на промена на концентрацијата ^{3,4}	$\nu(B), r(B)$	$\nu(B) = dc(B)/dt$	$mol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$
Брзина на реакцијата (дефинирана преку количинска концентрација) ^{2,4,5}	v	$v = \dot{\xi}/V$ $= -\nu(B)^{-1} dc(B)/dt$	$mol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$
Парцијален ред на реакцијата ⁶	$n(B)$	$v = k \prod c(B)^{n(B)}$	1
Вкупен ред на реакцијата	n	$n = \sum n(B)$	1
Константа на брзината на реакцијата	k	$k = v / \prod c(B)^{n(B)}$	$(mol^{-1} \cdot m^3)^{n-1} \cdot s^{-1}$
Болцманова (Boltzmann) константа ⁷	k, k_B		$J \cdot K^{-1}$
Полувреме (на реакцијата) ⁸	$t_{1/2}$	$t = t_{1/2}$ кога $c = c_0/2$	s
Релаксационо време ⁸	τ	$\tau = 1 / (k_1 + k_{-1})$	s
Активациона енергија, енергија на активацијата	E_a	$E_a = RT^2 d \ln k / dT$	$J \cdot mol^{-1}$
Предекспоненцијален фактор	A	$A = k / \exp(-E_a/RT)$	$(mol^{-1} \cdot m^3)^{n-1} \cdot s^{-1}$
Пречник за судир	d	$d_{AB} = r_A + r_B$	m
Ефикасен пресек за судир	σ	$\sigma_{AB} = \pi d_{AB}^2$	m^2
Судирна фреквенција ¹⁰	Z_A		s^{-1}

Физичка величина	Симбол	Дефиниција	SI единица
Судирен број ¹¹	Z_{AB}, Z_{AA}		$m^{-3} \cdot s^{-1}$
Фактор на судирна фреквенција	z_{AB}	$z_{AB} = Z_{AB}/N_A c_A c_B$	$m^3 \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1}$
Стандардна активациона енталпија ¹²	$\Delta^\ddagger H^\ominus, \Delta H^\ddagger$		$J \cdot mol^{-1}$
Стандардна активациона ентропија ¹²	$\Delta^\ddagger S^\ominus, \Delta S^\ddagger$		$J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$
Стандардна активациона Гибсова енергија ¹²	$\Delta^\ddagger G^\ominus, \Delta G^\ddagger$		$J \cdot mol^{-1}$

1. *Пример:* Брзина на промена на притисокот, $p = dp/dt$, за која SI единицата е $Pa \cdot s^{-1}$.

2. Реакцијата на која се однесува оваа величина мора да биде специфицирана и запишана во видот $0 = \sum \nu(B)_V B$, каде што стехиометрискиот коефициент $\nu(B)_i$ е негативен ако B_i е реактант, а позитивен ако B_i е продукт на реакцијата.

3. Станува збор за брзина на промена на концентрацијата како резултат на одвивање на хемиската реакција.

4. Освен преку количинската концентрација, ν_B, r_B и ν може да бидат дефинирани и преку *парцијалниот притисок, бројната концентрација* итн. Брзината на реакцијата може да се дефинира само за реакција со специфицирана реакциона равенка.

5. Равенството $\nu = \nu(B)^{-1} dc(B)/dt$ важи само за случај кога $V = \text{const}$.

6. Симболот се однесува на реактантот B. Не смее да се замени со симболот за *количество* на реактантот B.

7. Кога има опасност од замена на константата на брзина и Болцмановата константа, последнава треба да се означува со k_B .

8. За полувреме на реакцијата може да се зборува ако во неа учествува само еден реактант или ако, при еднакви вредности за стехиометриските коефициенти, почетните концентрации на сите реактанти се еднакви.

9. Дефиницијата се однесува на повратни реакции од прв ред, за кои брзината на *директната* реакција (реакцијата од лево кон десно) и на *обратната* реакција се карактеризирани со константите на брзината k_1 и k_{-1} , соодветно.

10. Судирната фреквенција Z_A е однос на бројот на судири на една честичка со честички од типот A и времето што треба да измине за да дојде до ваков број на судири.

11. Судирниот број Z_{AB} е однос меѓу бројот на судири меѓу разноимени честички и производот од времето што е потребно за тоа и волуменот во кој се случуваат судирите. Судирниот број Z_{AA} е дефиниран на сличен начин, но за судири меѓу едноимени молекули.

12. Величините $\Delta^\ddagger H^\ominus$, $\Delta^\ddagger S^\ominus$ и $\Delta^\ddagger G^\ominus$ се употребуваат во *теоријата за преодна состојба* кај хемиските реакции (по правило – елементарни).

Релацијата што ги поврзува овие величини е $\Delta^\ddagger G^\ominus = \Delta H^\ominus - T \Delta^\ddagger S^\ominus$, а соодносот со константата на брзината е $k = \kappa(k_B T/h) \exp(-\Delta^\ddagger G^\ominus/RT)$, каде што κ е *трансмисиониот коефициент* (тој ја дава веројатноста дека активираниот комплекс ќе се претвори во продукти на реакцијата, а не назад во реактанти). Константата на брзината k има димензии на константа на брзината за реакција од прв ред, а се добива (во случај на реакција од n -ти ред) со множење на константата на брзина за реакција од n -ти ред со $(c^\ominus)^{n-1}$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Г. Јовановски, З. Здравковски, *Глас. хем. технол. Македонија*, 10 (1-2), 77 (1991).

[2] I. Mills, T. Cvitaš, K. Homann, N. Kallay and K. Kuchitsu, *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, Inter-

national Union of Pure and Applied Chemistry, Blackwell Scientific Publications, Oxford (1989).

[3] Г. Јовановски, З. Здравковски, *Глас. хем. технол. Македонија*, 9, 209 (1990).

ИСПРАВКИ

Во трудот со наслов: **2. ВЕЛИЧИНИ, ЕДИНИЦИ И СИМБОЛИ ВО ХЕМИЈАТА**, објавен во вол. 10, стр, 77 од *Гласникот* од авторите Г. Јовановски и З. Здравковски, појавени се неколку печатни грешки кои сметаме дека е неопходно да се коригираат.

1. Само индексите на симболите на физичките величини кои сами за себе претставуваат физички величини се пишуваат со коси букви. Во сите други случаи индексите се пишуваат со прави букви. Ако, наместо во вид на индекс, ознаката (на пример, во супстанцата) е напишана во заграда до друга физичка величина, таа, исто така се пишува со права буква, а не со коса, како што погрешно е отпечатено во текстот

Примери:

Стои	Треба
N_A	N_A
$n(B)$	$n(B)$
σ_A	σ_A
B_A	B_A
.....
.....

2. Во табелата 3. 1. ОПШТА ХЕМИЈА, на стр. 78

	Физичка величина	Симбол	Дефиниција
Стои:	Масена концентрација ² (масена густина)	ρ	$(B) = m(B)/V$
Треба:	Масена концентрација ² (масена густина)	γ, ρ	$\gamma(B) = m(B)/V$

3. Во табелата 3. 2. МОЛЕКУЛАРНИ И СРОДНИ НАУКИ, на стр. 80

	Физичка величина	Симбол	Дефиниција
Стои:	Електрична susceptibilност	e	$e = \epsilon - 1$
	Магнетна susceptibilност	m	$m = \mu_r - 1$
	Константа на вибрациона анхармоничност	ω_e, x_e	
Треба:	Електрична susceptibilност	χ_e	$\chi_e = \epsilon_r - 1$
	Магнетна susceptibilност	χ_m	$\chi_m = \mu_r - 1$
	Константа на вибрациона анхармоничност	$\omega_e x_e, x_{rs}$	