

Εισαγωγή





physics

chemistry

me, a biology student who just likes plants and animals

@daily_sciencememes



Φυσικοχημεία (ΒΙΟΛ-151)

Υποχρεωτικό μάθημα Β' εξαμήνου

Μονάδες ECTS: 6

26 διαλέξεις κάθε Δευτέρα και Τετάρτη 16.00-18.00
(Αμφιθέατρο Β)

Διδάσκων:

Δρ. Γιώργος Ι. Τσερεβελάκης

Τμήμα Βιολογίας Παν. Κρήτης

Γραφείο Γ.308α (Επίπεδο 3, δίπλα στη ροτόντα)

Τηλ. 2810-394423

E-mail: tserevel@uoc.gr

Ιστοσελίδα: <http://physchembio.biology.uoc.gr>



Προτεινόμενη Βιβλιογραφία

1. P.W. Atkins, J. de Paula ‘Φυσικοχημεία’ (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2014).
2. P.W. Atkins, J. de Paula “Physical chemistry for the life sciences”, 2nd edition, Oxford University Press, NY, 2011
3. K. E. van Hodle, W. Curtis Johnson, P. Shing Ho, ‘Βιοφυσική, Αρχές Φυσικής Βιοχημείας’ (Εκδόσεις EMBPYO, Αθήνα, 2010).
4. G. G. Hammes, ‘Φυσικοχημεία στις Βιολογικές Επιστήμες’, (Εκδ. Ευρ. Κωσταράκη, Αθήνα 2012).
5. R. Chang, ‘Physical Chemistry for the Chemical and Biological Sciences’, Univ. Science Books, Sausalito CA, 2000.
6. K.W. Kolasinski ‘Φυσικοχημεία’ (Εκδόσεις Κριτική, Α2020)
7. R. Chang, ‘Physical Chemistry for the Biosciences’, Univ. Science Books, Sausalito CA, 2004.
8. Σ. Τραχανάς, «Κβαντομηχανική Ι» (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2005).



Υψηλή μαθήματος

Εισαγωγή

- Άτομα, ιόντα, μόρια, Δεσμικές και μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις, Καταστάσεις της ύλης, Μορφές ενέργειας, Κατανομή Boltzmann

Βιοχημική θερμοδυναμική

- **Ο πρώτος νόμος** (Διατήρηση της ενέργειας, Εσωτερική ενέργεια και ενθαλπία, φυσικές και χημικές μεταβολές)
- **Ο δεύτερος νόμος** (Εντροπία, Ενέργεια Gibbs)
- **Ισορροπία φάσεων** (Θερμοδυναμική μετάπτωσης φάσης, Μετάπτωση φάσης σε βιολογικά μόρια, Θερμοδυναμική περιγραφή μειγμάτων, Προσθετικές ιδιότητες)
- **Θερμοδυναμική μεταφοράς ιόντων** (Ιόντα σε διάλυμα, Παθητική και ενεργητική μεταφορά ιόντων διαμέσου βιολογικών μεμβρανών, Κανάλια / αντλίες ιόντων)

Δομή βιολογικών μορίων

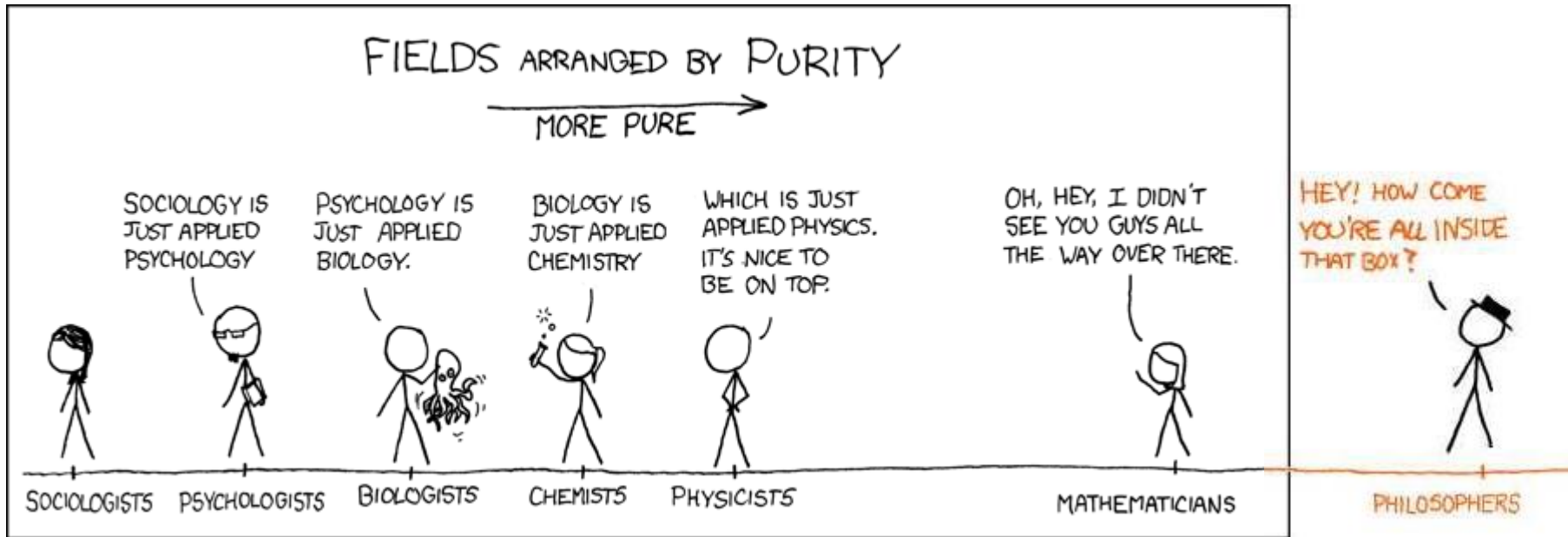
- **Μικροσκοπικά συστήματα και κβάντωση** (Αρχές κβαντικής θεωρίας, Εφαρμογές κβαντικής θεωρίας σε απλά συστήματα, Υδρογονοειδή άτομα, Δομή πολυηλεκτρονιακών ατόμων)
- **Ο χημικός δεσμός** (Θεωρία μοριακών τροχιακών LCAO, Ομοπυρηνικά και ετεροπυρηνικά διατομικά μόρια)
- **Μακρομόρια και αυτοσυναρμολόγηση** (Τεχνικές μελέτης μακρομορίων π.χ. υπερφυγοκέντριση, φασματοσκοπία μάζας, σκέδαση φωτός λείζερ, κρυσταλλογραφία ακτίνων X, Αλληλεπιδράσεις μεταξύ φορτίων, Διπολικές ροπές, Δεσμός υδρογόνου, Εφαρμογές σε πρωτεΐνες και νουκλεϊκά οξέα)

Βιοχημική φασματοσκοπία

- **Οπτική φασματοσκοπία** (Γενικά χαρακτηριστικά φασματοσκοπίας, Δομητικά φάσματα, Φάσματα στο ορατό και υπεριώδες, Φθορισμός και φωσφορισμός)
- **Μαγνητικός συντονισμός NMR** (Αρχές μαγνητικού συντονισμού, Πληροφορίες των φασμάτων NMR, Παλμικές τεχνικές NMR)



Φυσικοχημεία



Η Φυσικοχημεία μελετάει τα φυσικά φαινόμενα που παρατηρούνται σε χημικά συστήματα και γι' αυτό θεωρείται ο συνδετικός κρίκος μεταξύ Φυσικής και Χημείας.



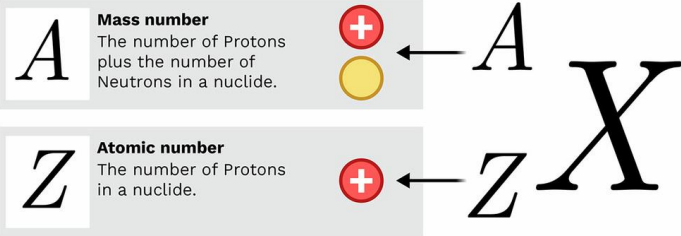
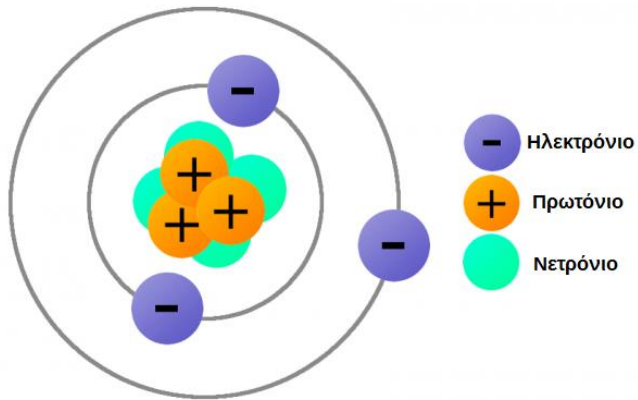
Νόμπελ Χημείας από το 2010

Έτος	Όνομα	Θέμα
2010	Ρίτσαρντ Χεκ, Έι-Τσι Νεγκίσι, Ακίρα Σουζούκι	«για τις διασταυρούμενες συζεύξεις που καταλύονται από παλλάδιο στην οργανική σύνθεση» ^[99]
2011	Νταν Σέχτμαν	«για την ανακάλυψη των ημικρυστάλλων (quasicrystals)» ^[100]
2012	Ρόμπερτ Λέφκοβιτς, Μπράιαν Κομπίλκα	«για τη μελέτη των G-πρωτεϊνικών υποδοχέων » ^[101]
2013	Μάρτιν Κάρπλους, Μάικλ Λέβιτ, Αριεχ Ουάρσελ	«για την ανάπτυξη μοντέλων πολλαπλών κλιμάκων για πολύπλοκα χημικά συστήματα» ^[102]
2014	Έρικ Μπέτζιγκ, Στέφαν Χελ, Ουίλιαμ Έσκο Μούρνερ	«για την ανάπτυξη της μικροσκοπίας φθορισμού υψηλής ανάλυσης» ^[103]
2015	Τόμας Λίνταλ, Πολ Λ. Μόντριχ, Αζίζ Σανκάρ	«για τις μηχανιστικές μελέτες τους πάνω στην αποκατάσταση του DNA » ^[104]
2016	Ζαν-Πιερ Σοβάζ, Φρέιζερ Στόνταρτ, Μπεν Φέρινγκα	«για τον σχεδιασμό και τη σύνθεση μοριακών μηχανών » ^[105]
2017	Ζαν Ντυμποσέ, Γιάκιμ Φρανκ, Ρίτσαρντ Χέντερσον	«για την ανάπτυξη κρυοηλεκτρονικής μικροσκοπίας για τον καθορισμό της δομής βιομοριών σε μίγματα σε υψηλή ανάλυση » ^[106]
2018	Φράνσις Αρνολντ, Τζορτζ Π. Σμιθ, Γκρέγορι Ουίντερ	" για τις έρευνές τους με τη χρήση της κατευθυνόμενης εξέλιξης για την παραγωγή ενζύμων για νέες χημικές και φαρμακευτικές ουσίες". ^[107]

Βραβεία Νόμπελ Χημείας, 2020

Έτος	Όνομα	Εθνικότητα	Θέμα
2020	Εμμανουέλ Σαρπαντιέ, Τζένιφερ Ντούντα	Γαλλίδα, Αμερικανίδα	"για την ανάπτυξη μιας μεθόδου τροποποίησης των γονιδίων" ^[109]

Το μάθημα της Φυσικοχημείας δίνει τις απαραίτητες βάσεις σε έναν βιολόγο όσον αφορά στην ουσιαστική κατανόηση της δομής των ατόμων και μορίων καθώς και της συμπεριφοράς τους σε χημικά συστήματα.

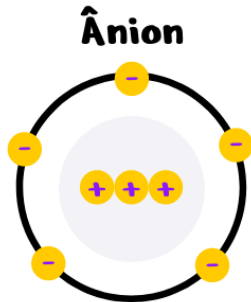
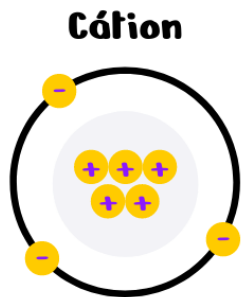


- Το άτομο (ετυμ. = άτμητο < α στερητ. + τέμνω) είναι το μικρότερο σωματίδιο ενός χημικού στοιχείου το οποίο διατηρεί τις χημικές ιδιότητες του στοιχείου με την έννοια ότι παραμένει αμετάβλητο κατά την εξέλιξη ενός χημικού φαινομένου (χημική αντίδραση).

- Τα άτομα χαρακτηρίζονται από τον ατομικό αριθμό Z , δηλαδή τον αριθμό των πρωτονίων στον πυρήνα τους. Η μεγαλύτερη μάζα περιέχεται στον πυρήνα, ο οποίος περιβάλλεται από Z ηλεκτρόνια με φορτίο $-e$ έτσι ώστε τελικά το άτομο να είναι ηλεκτρικά ουδέτερο.

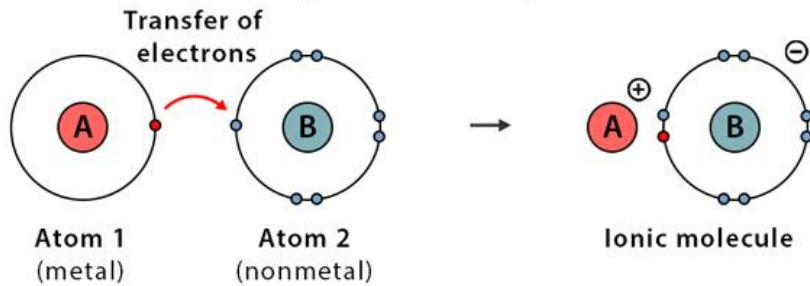
- Ισότοπα είναι τα άτομα με τον ίδιο ατομικό αριθμό Z αλλά με διαφορετικό μαζικό αριθμό A (συνολικός αριθμός πρωτονίων και νετρονίων στον πυρήνα).

- Η απώλεια ηλεκτρονίων από ένα άτομο οδηγεί στο σχηματισμό κατιόντων (π.χ. Na^+ , Ca^{2+}) ενώ το κέρδος ηλεκτρονίων στο σχηματισμό ανιόντων (π.χ. Cl^{1-} , O^{2-}).



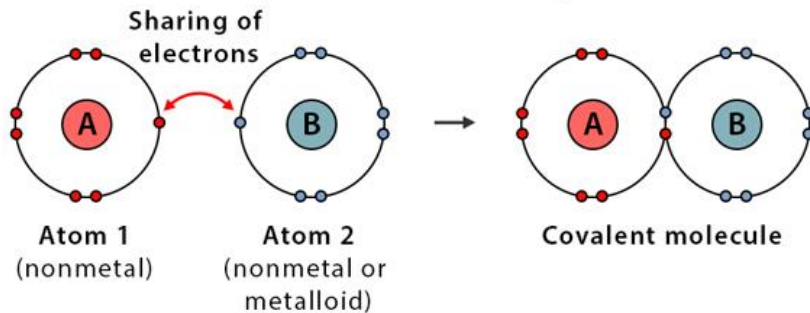
Είδη δεσμών ανάμεσα στα άτομα

Ionic Bond



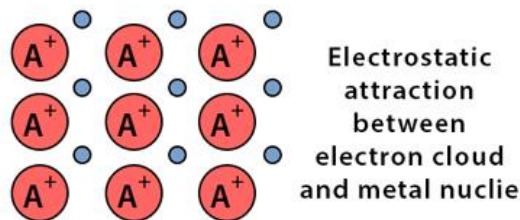
Ο ιοντικός δεσμός προέρχεται από την ηλεκτροστατική έλξη ανάμεσα σε κατιόντα και ανιόντα και οδηγεί στο σχηματισμό εύθραυστων διατάξεων (ιοντικά στερεά).

Covalent Bond



Ο ομοιοπολικός δεσμός προέρχεται από το μοίρασμα των ηλεκτρονίων και είναι υπεύθυνος για την ύπαρξη διακριτών μορίων όπως το νερό και οι πολύπλοκες πρωτεΐνες.

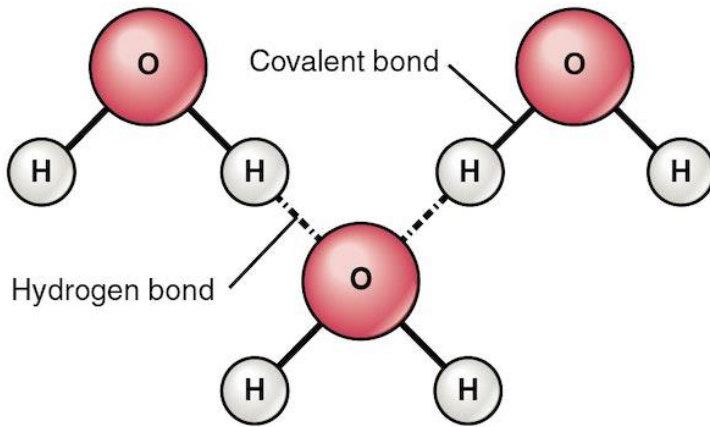
Metallic Bond



Ο μεταλλικός δεσμός προκύπτει όταν τα άτομα προσφέρουν τα ηλεκτρόνιά τους για τον σχηματισμό μια κοινής «θάλασσας» ηλεκτρονίων. Έτσι σχηματίζονται τα μέταλλα με τη χαρακτηριστική τους λάμψη και υψηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα.



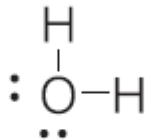
Δεσμοί υδρογόνου στο νερό



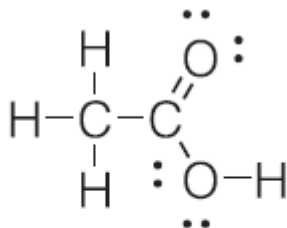
- Ο ομοιοπολικός δεσμός παίζει το σημαντικότερο ρόλο στη βιολογία εφόσον προσφέρει τη σταθερότητα σε οργανικά μόρια όπως το DNA και οι πρωτεΐνες.
- Σημαντικό ρόλο στον καθορισμό του σχήματος των βιολογικών μορίων παίζουν οι ασθενέστεροι δεσμοί υδρογόνου, (~10% της ισχύος των ομοιοπολικών δεσμών).
- Ο δεσμός υδρογόνου είναι η ηλεκτροστατική έλξη ανάμεσα σε ένα άτομο H το οποίο σχηματίζει ομοιοπολικό δεσμό με ένα ηλεκτραρνητικότερο άτομο (N, O, F), και ένα άλλο ηλεκτραρνητικό άτομο.
- Η ενδιάμεση ισχύ του προσδίδει από τη μία σταθερότητα, από την άλλη όμως επιτρέπει τις μεταβολές σχήματος που απαιτούνται για τη λειτουργία ενός ενζύμου ή νουκλεϊκού οξέος



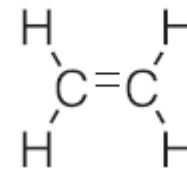
Δομές κατά Λιούις



1 Water, H₂O



2 Acetic acid, CH₃COOH



3 Ethene, C₂H₄

- Στις δομές κατά Λιούις κάθε στοιχείο παρουσιάζεται με το χημικό του σύμβολο.
- Τα ηλεκτρόνια σθένους του στοιχείου συμβολίζονται με τελείες που σχεδιάζονται ανά ζεύγη.
- Στις δομές κατά Λιούις σχεδιάζονται μόνο τα ηλεκτρόνια σθένους και τα υπόλοιπα παραλείπονται.
- Οι ομοιοπολικοί δεσμοί (απλοί, διπλοί, τριπλοί) συμβολίζονται με παύλες.



Δεν δείχνουν το πραγματικό 3D σχήμα του μορίου



- Μέσω θεωρίας VSEPR (valence-shell electron repulsion), υποθέτουμε πως οι περιοχές ηλεκτρονιακής πυκνότητας υιοθετούν θέσεις ελαχιστοποίησης των μεταξύ τους απώσεων.
- Έτσι μπορούμε να προσδιορίσουμε τη διάταξη των ατόμων σε ένα μόριο.



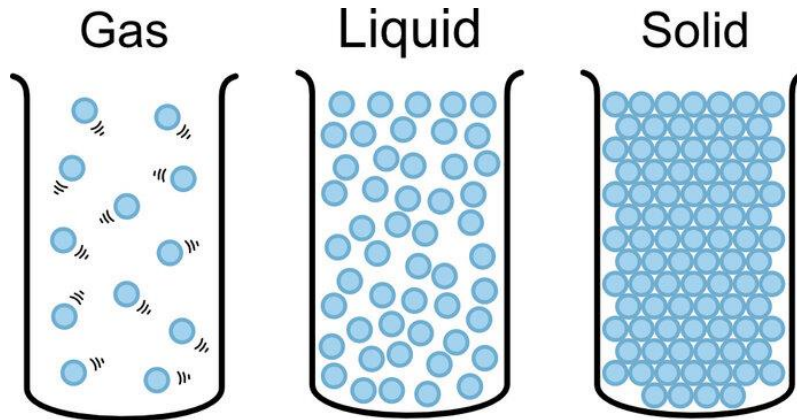
Καταστάσεις της ύλης

DIFFERENCE BETWEEN SOLID, LIQUID AND GAS

teachoo



- **Αέριο** είναι μια ρευστή μορφή της ύλης που καταλαμβάνει όλο το χώρο του δοχείου που το περιέχει.
- **Υγρό** είναι μια ρευστή μορφή της ύλης που έχει καλά καθορισμένη επιφάνεια και (εντός βαρυτικού πεδίου) γεμίζει το χαμηλότερο τμήμα του δοχείου που το περιέχει.
- **Στερεό** είναι μια μορφή της ύλης που διατηρεί το σχήμα της ανεξαρτήτως του δοχείου που το περιέχει.



Τι συμβαίνει στα μόρια κατά την τήξη ή εξάτμιση;

- **Αέριο:** Μεγάλη απόσταση μεταξύ μορίων, άτακτη κίνηση, αραιές συγκρούσεις
- **Υγρό:** Μόρια σε επαφή με περιορισμένη κίνηση, συνεχείς μετακινήσεις με εύρος λιγότερο από μια μοριακή διάμετρο
- **Στερεό:** «Παγιδευμένα» μόρια σε επαφή που ταλαντώνονται γύρω από μια μέση θέση



Κατάσταση ενός υλικού δείγματος ονομάζουμε μια συγκεκριμένη συνθήκη που περιγράφεται με βάση τη φυσική του μορφή (αέριο, υγρό, στερεό), τον όγκο, τη θερμοκρασία καθώς και την ποσότητα ύλης που το αποτελεί.

Κατάσταση A

1 kg υδρογόνου που καταλαμβάνει όγκο 10 dm^3 σε συγκεκριμένη πίεση p και θερμοκρασία T .

Κατάσταση B

1 kg υδρογόνου που καταλαμβάνει όγκο 5 dm^3 σε συγκεκριμένη πίεση p και θερμοκρασία T .

- **Μάζα (m)** είναι ένα μέτρο της ποσότητας ύλης που περιέχεται σε ένα δείγμα (Μονάδα: 1kg)
- **Όγκος (V)** είναι ένα μέτρο του χώρου που καταλαμβάνεται από ένα δείγμα (Μονάδα: 1 m^3)
- **Ποσότητα ύλης (n)** είναι ένα μέτρο του αριθμού συγκεκριμένων οντοτήτων N που περιέχονται σε ένα δείγμα (Μονάδα: 1 mol)
- 1 mol μια ουσίας περιέχει ίσο αριθμό οντοτήτων με τον αριθμό των ατόμων σε 12 g άνθρακα-12.

Υπολογισμός mol: $n = N/N_A$

Σταθερά Avogadro: $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Υπολογισμός mol μέσω μάζας m: $n = \frac{m}{M}$

όπου M το μοριακό βάρος (Μονάδα: g/mol)

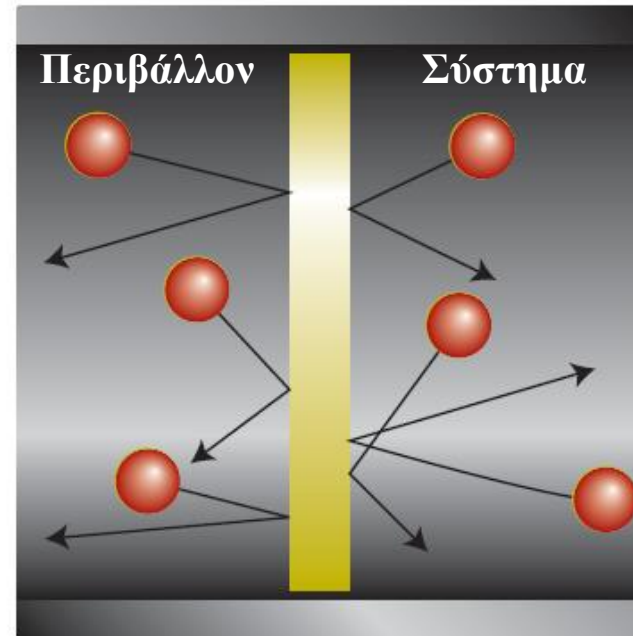


- **Πίεση (p)** είναι η δύναμη που ασκείται σε ένα δείγμα διαιρεμένη με την επιφάνεια στην οποία εφαρμόζεται η δύναμη αυτή (Μονάδα: 1 Pa)

Μηχανική ισορροπία

Table F.1 Pressure units and conversion factors*

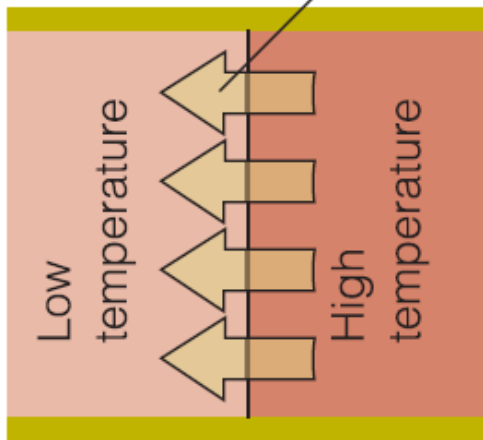
pascal, Pa	$1 \text{ Pa} = 1 \text{ N m}^{-2}$
bar	$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$
atmosphere, atm	$1 \text{ atm} = 101.325 \text{ kPa}$ $= 1.013 25 \text{ bar}$
torr, Torr [†]	$760 \text{ Torr} = 1 \text{ atm}$ $1 \text{ Torr} = 133.32 \text{ Pa}$



Ένα σύστημα είναι σε μηχανική ισορροπία με το περιβάλλον εάν χωρίζεται από αυτό μέσω ενός κινητού τοιχώματος και η εξωτερική πίεση είναι ίση με την πίεση του αερίου μέσα στο σύστημα

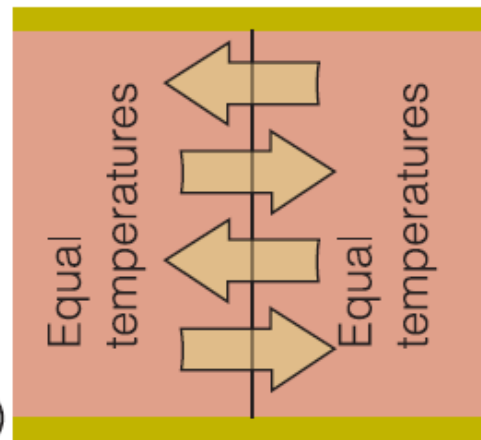
- **Θερμοκρασία (T)** ορίζεται η ιδιότητα ενός αντικειμένου που καθορίζει την κατεύθυνση της ροής ενέργειας έπειτα από την επαφή του με ένα άλλο αντικείμενο. Η ενέργεια θα ρέει από την υψηλότερη προς τη χαμηλότερη θερμοκρασία (Μονάδα: 1 K)

Ροή ενέργειας Energy



(a)

Θερμική ισορροπία



(b)

Μετατροπή βαθμών K σε °C

$$\theta/^{\circ}\text{C} = T/\text{K} - 273.15$$

- **Εντατική ιδιότητα** είναι μια ιδιότητα του συστήματος που **δεν** εξαρτάται από το μέγεθος του δείγματος (θερμοκρασία, πίεση, μοριακή μάζα, γραμμομοριακές ποσότητες)
- **Εκτατική ιδιότητα** είναι μια ιδιότητα του συστήματος που εξαρτάται από το μέγεθος του δείγματος (π.χ. μάζα, όγκος, ποσότητα ύλης)





Μπορώ να έχω ένα δείγμα νερού 5.5 mmol σε όγκο 100 cm³ πίεση 100 kPa και θερμοκρασία 500 K ταυτόχρονα;



Όχι! Η πίεση θα πρέπει να γίνει υποχρεωτικά **230 kPa**

Δεν μπορώ να έχω οποιονδήποτε συνδυασμό παραμέτρων θέλω. Η κάθε ουσία υπακούει σε μια εξίσωση κατάστασης που έχει τη γενική μορφή...



$$p = f(n, V, T)$$

Η εξίσωση κατάστασης δεν είναι συνήθως γνωστή, ωστόσο για ένα ιδανικό (τέλειο) αέριο...



$$p = \frac{nRT}{V}$$

Η εξίσωση ισχύει ικανοποιητικά για πραγματικά αέρια στο όριο των χαμηλών πιέσεων, οπότε και οι διαμοριακές δυνάμεις θεωρούνται αμελητέες



$$p \rightarrow 0$$

Τιμές σταθεράς αερίων R

R = 8.314 47	J K ⁻¹ mol ⁻¹
8.314 47	kPa dm ³ K ⁻¹ mol ⁻¹
8.205 74 × 10 ⁻²	atm dm ³ K ⁻¹ mol ⁻¹
62.364	Torr dm ³ K ⁻¹ mol ⁻¹
1.987 21	cal K ⁻¹ mol ⁻¹



A brief illustration

Consider the calculation of the pressure in kilopascals exerted by 1.25 g of nitrogen gas in a flask of volume 250 mL (0.250 dm^3) at 20°C . The amount of N_2 molecules (of molar mass $M = 28.02 \text{ g mol}^{-1}$) present is

$$n = \frac{m}{M} = \frac{1.25 \text{ g}}{28.02 \text{ g mol}^{-1}} = \frac{1.25}{28.02} \text{ mol}$$

The temperature of the sample is $T/\text{K} = 20 + 273.15$. Therefore, from $p = nRT/V$,

$$p = \frac{\overbrace{(1.25/28.02) \text{ mol}}^n \times \overbrace{(8.3145 \text{ kPa dm}^3 \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1})}^R \times \overbrace{(20 + 273.15 \text{ K})}^{T=293 \text{ K}}}{\underbrace{0.250 \text{ dm}^3}_{V=250 \text{ mL}}}$$
$$= 435 \text{ kPa}$$



Ο γραμμομοριακός όγκος V_m ορίζεται ως ο όγκος του αερίου V διαιρεμένος με τον αριθμό των mol n .

$$V_m = \frac{V}{n}$$

Συνεπώς, για ένα τέλειο αέριο θα ισχύει ότι

$$V_m = \frac{V}{n} = \frac{nRT}{np} = \frac{RT}{p}$$

Standard ambient temperature and pressure (SATP)

25°C (more precisely, 298.15 K) and 1 bar

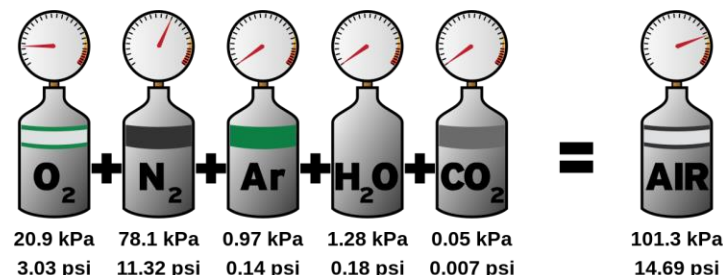
At SATP, $V_m = 24.79 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$ for a perfect gas

Standard temperature and pressure (STP)

0°C and 1 atm

At STP, $V_m = 22.41 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$ for a perfect gas

Νόμος Dalton: «Η πίεση που ασκείται από ένα μείγμα αερίων είναι το άθροισμα των πιέσεων που θα ασκούσε το καθένα από τα συστατικά, αν καταλάμβανε μόνο του το ίδιο δοχείο»



$$p = p_A + p_B + \dots$$



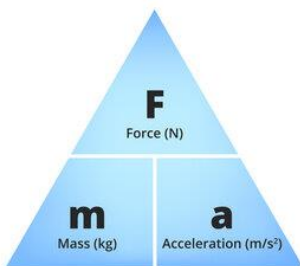
Ενέργεια

- Η ενέργεια E είναι η δυνατότητα παραγωγής έργου.
- Έργο είναι η διαδικασία μετακίνησης ενάντια σε μια **αντιτιθέμενη δύναμη**.

Examples of WORK DONE in Physics

Change in Position or Displacement	Change in Speed or Direction	Change in Shape or Size
 <p>A man pushing a box and moving it from location A to another location B</p>	 <p>In a school football match, when a boy hits the ball to dodge another player</p>	 <p>A compressed spring when released does work on a ball</p>
 <p>A crane tow a broken car and takes it to a workshop</p>	 <p>A batsman hitting a ball during a cricket match</p>	 <p>Kids sitting at a place and making different shapes of objects with help of plasticine. They are doing work because they are changing the shape of the plasticine.</p>

NEWTON'S SECOND LAW TRIANGLE

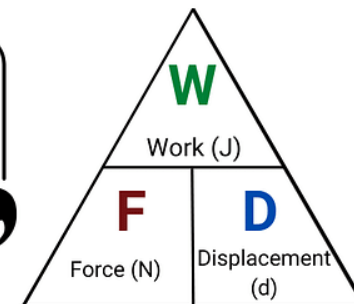


$$F = m \cdot a$$
$$m = F : a$$
$$a = F : m$$



Work Formula

“
 $W = F \times d$
”



A brief illustration

A bird of mass 50 g flies from the ground to a branch 10 m above. The force of gravity on an object of mass m close to the surface of the Earth is mg , where g is the 'acceleration of free fall': $g = 9.81 \text{ m s}^{-2}$. Therefore, the work it has to do against gravity is

$$w = mgd = (0.050 \text{ kg}) \times (9.81 \text{ m s}^{-2}) \times (10 \text{ m}) = 4.9 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2}$$

We would report this value as 4.9 J, where $\text{J} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2}$.

Who am I? I am...

Potential Energy

I am stored energy and the energy of position; all objects that are not moving have this energy.



Different types of potential energy include gravitational, chemical, nuclear, elastic, stored mechanical and magnetic

$$E_p = mgh$$

$$E_p = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Who am I? I am...

Kinetic Energy

I am energy in motion. All moving objects have this energy.

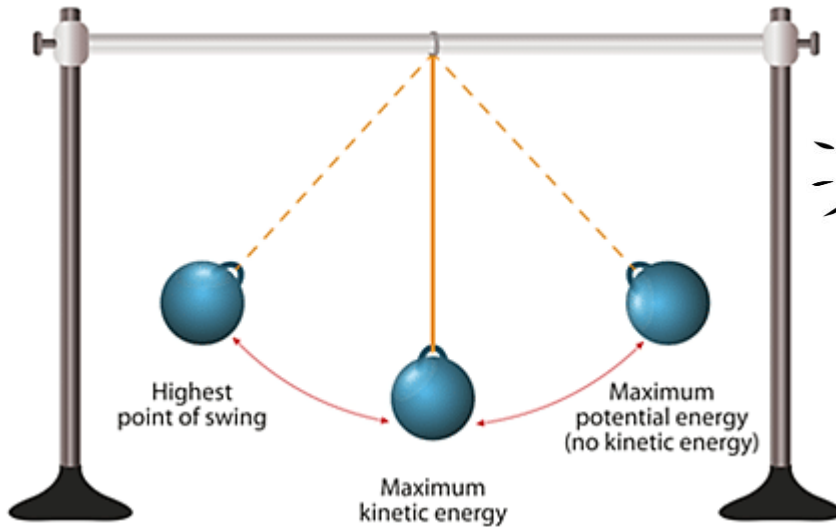


Different types of kinetic energy include electrical, thermal, radiant/electromagnetic, mechanical, and sound

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2$$

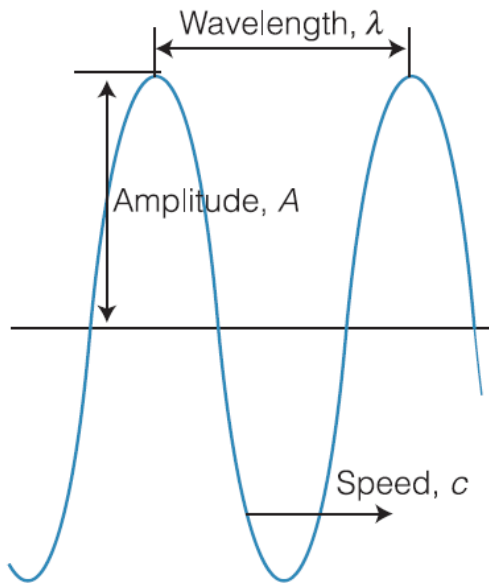


Διατήρηση της μηχανικής ενέργειας



Η μηχανική ενέργεια διατηρείται εφόσον το σύστημα είναι μονωμένο από εξωτερικές επιδράσεις όπως π.χ. η τριβή από τον αέρα.

$$E = E_k + E_p$$



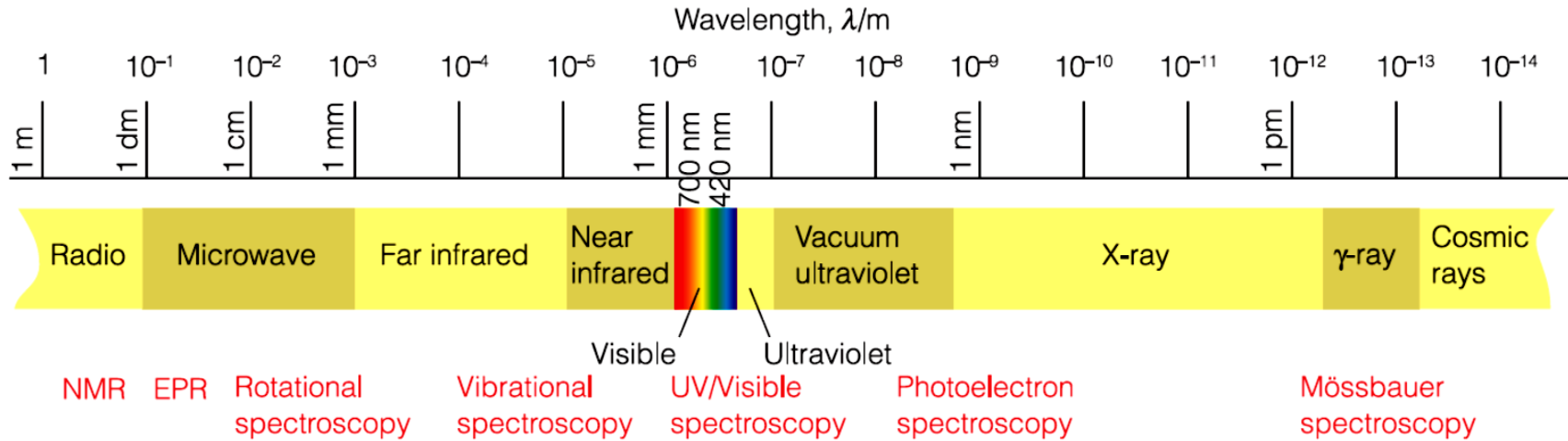
Η ενέργεια μπορεί να είναι παρούσα ακόμα και χωρίς την παρουσία ύλης, έχοντας τη μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, δηλαδή ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία που ταξιδεύουν με ταχύτητα $c = 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$ στο κενό.

- **Πλάτος A:** Η μέγιστη μετατόπιση. Το τετράγωνό του είναι ανάλογο της έντασης του κύματος
- **Συχνότητα ν:** Ο αριθμός των κυμάτων που περνάνε από ένα σταθερό σημείο στη μονάδα του χρόνου (Μονάδα: 1 Hz)
- **Μήκος κύματος:** Η απόσταση ανάμεσα σε δύο διαδοχικές κορυφές του κύματος

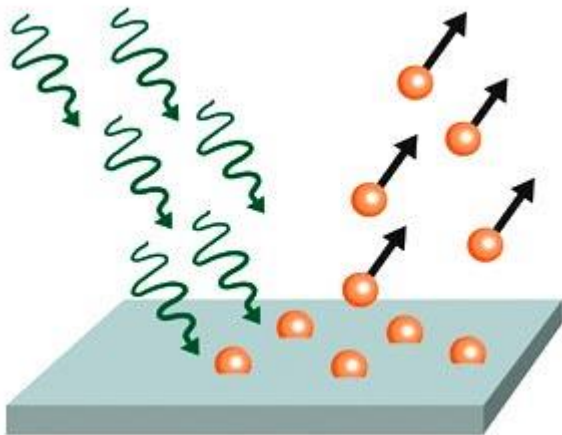
Ταχύτητα κύματος $\lambda \nu = c$



Το ηλεκτρομαγνητικό φάσμα



Τα φωτόνια αποτελούν τα κβάντα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας



The Relationship between Energy (E), Frequency (ν), Wavelength (λ), and Planck's Constant (h)

$$E = h\nu$$

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$



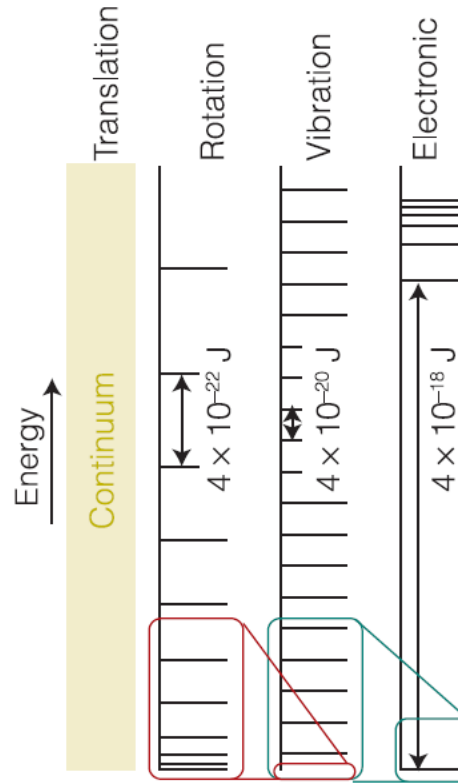
Κατανομή Boltzmann

THERMODYNAMICS AND STATISTICAL MECHANICS

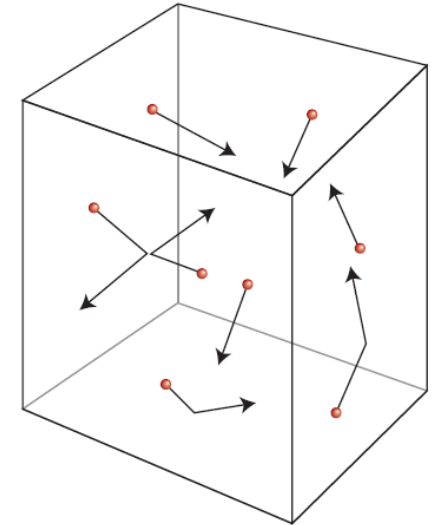
1.1 INTRODUCTION: THERMODYNAMICS AND STATISTICAL MECHANICS OF THE PERFECT GAS

Ludwig Boltzmann, who spent much of his life studying statistical mechanics, died in 1906, by his own hand. Paul Ehrenfest, carrying on the work, died similarly in 1933. Now it is our turn to study statistical mechanics. Perhaps it will be wise to approach the subject cautiously. We will begin by considering the simplest meaningful example, the perfect gas, in order

Κβάντωση μοριακών ενεργειών

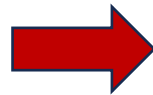


Τυχαία θερμική κίνηση των μορίων ($T > 0$)



Σταθερά Boltzmann
 $k = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

Ο λόγος πληθυσμών N_2 και N_1 σε καταστάσεις με ενέργειες E_1 και E_2 θα δίνεται από τη σχέση



$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-(E_2 - E_1)/kT}$$

Μέση ενέργεια μορίων $\sim kT$

Σχέση ανάμεσα σε k και R

$$R = N_A k$$



A brief illustration

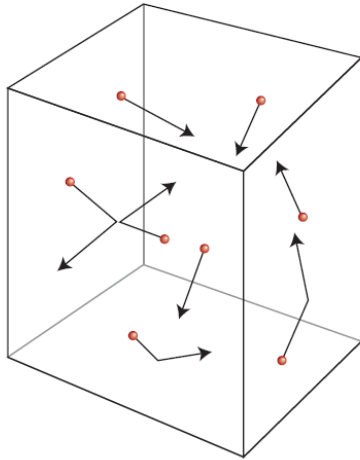
Suppose that two conformations of neighboring peptide groups in a polypeptide differ in energy by 7.5 kJ mol^{-1} , with conformation A higher in energy than conformation B. At body temperature (37°C , corresponding to 310 K) the ratio of populations of the two conformations is

$$\frac{N_A}{N_B} = e^{-(7500 \text{ J mol}^{-1}) / (8.3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \times 310 \text{ K})} = 0.054$$

That is, conformation B is about 18 times more abundant than conformation A.



Σύστημα ιδανικού αερίου σε θερμοκρασία T



- Τα μόρια κινούνται τυχαία και αδιάκοπα
- Είναι σημειακά σε μέγεθος
- Αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και με τα τοιχώματα του δοχείου μόνο με ελαστικές κρούσεις

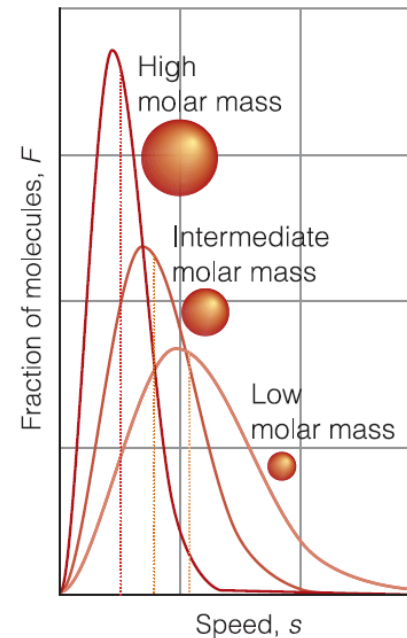
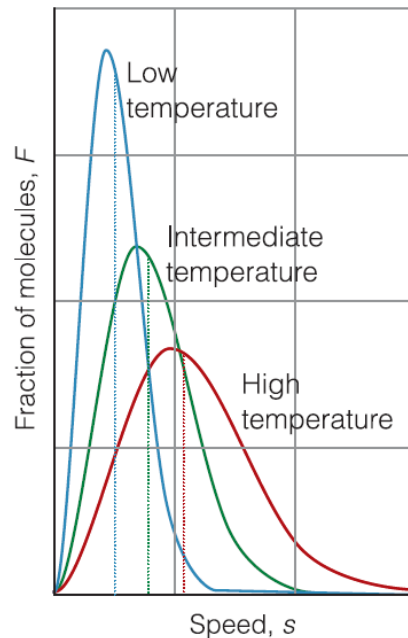
Κατανομή Maxwell-Boltzmann

Με αυξανόμενη T

- Αυξανόμενη μέση τιμή ταχύτητας
- Διεύρυνση κατανομής

Μέση τιμή ταχύτητας

$$\bar{c} = \left(\frac{8RT}{\pi M} \right)^{1/2}$$



- Ελαφριά μόρια έχουν ευρύτερη κατανομή
- Μεγαλύτερο κλάσμα έχει υψηλότερη ταχύτητα από τη μέση
- Βαριά μόρια έχουν στενές κατανομές και τα περισσότερα κινούνται με τη μέση ταχύτητα

