

VIHREÄN
SIIRTYMÄN
TUOTEKEHITYS

Power2X

Kineettinen
kaasuteoria
Reaktioyhtälöistä
Entalpia

Luennon sisällöstä

Tällä luennolla on tarkoitus tutustua joihinkin tarvittaviin perusmenetelmiin ja tuoda tuntemusta reaalikaasureaktioiden laskentaan

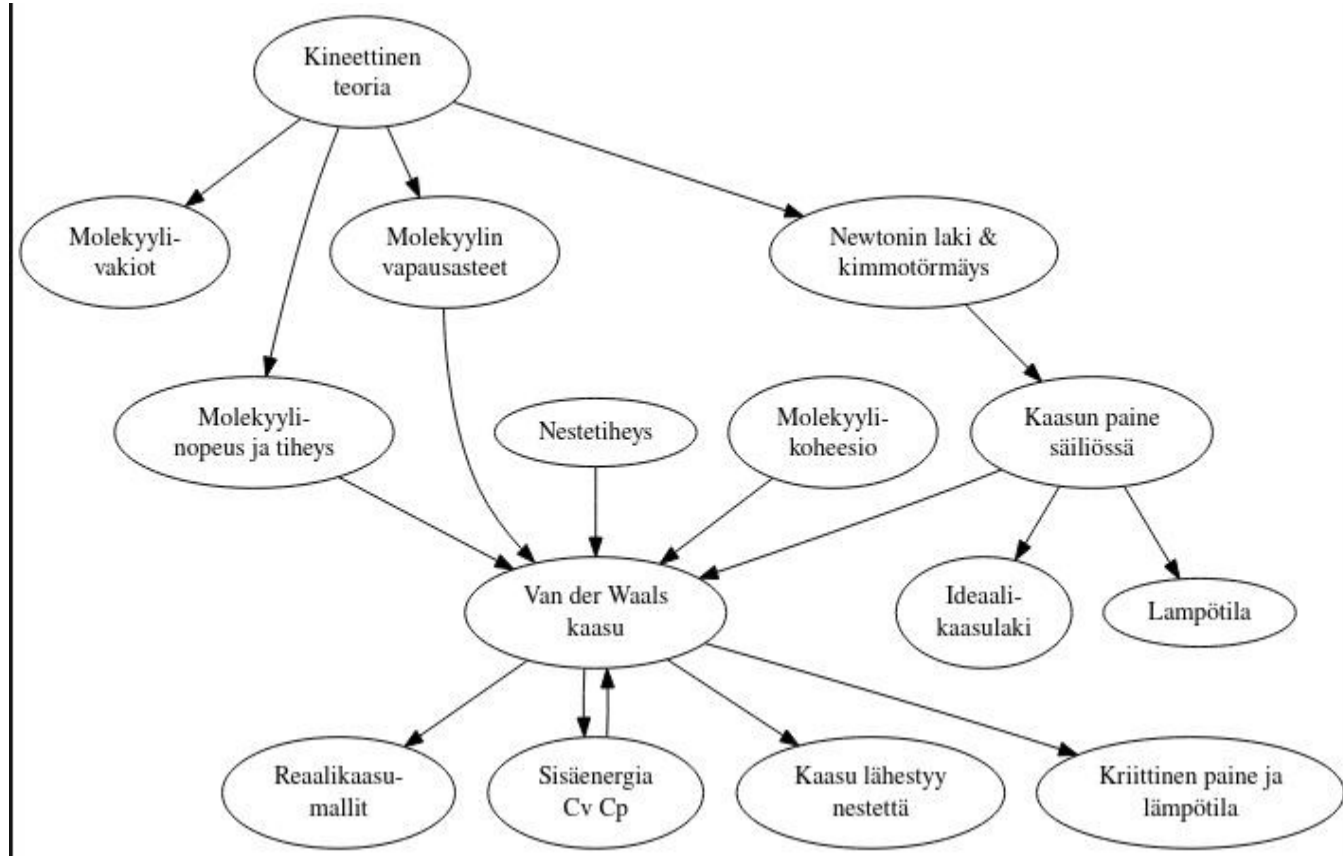
*Tämän luennon tarkoitus on kerrata lukiotason pitkän kemian ja fysiikan asioita ja sivittää syvemmin laskennallisen analyttisen ja fysikaalisen kemian menetelmistä, joita on hyvä tietää ja tuntea vetytalouden suunnittelussa. Tämän opintojakson toteuttamisen **yhtenä suurena haasteena** on ollut ministeriön yleiskoulutuksellinen vaatimus, **että esitietoja ei edellytetä**, ja siksi tähän luento on pakattu hyvin tiivistä muutamia tarpeelliseksi katsottuja laskennallisen kaasuteorian ja analyttisen kemian perusteita. Useita asioita jää kuitenkin käsittelemättä mm. kaksi- ja moniatomisten kaasujen isentrooppisen laajentumisen perusta eli rotaatioenergiat. Siksi tämä on vain rautaisannos esitietämystä, joita ei voi odottaa olevan kaikilla opintojakson opiskelijoilla olevan, johtuen hyvin heterogeenisestä lähtötasosta. Kaikkea sisältöä ei oleteta heti osattavan, tai tunnettavan perustasolla, mutta kuitenkin tiedettävän myöhempää syventymistä varten. Kysymys on kuratoidusta tutustuttamisesta itseopiskeluihin tärkeimpiin laskennallisesti relevantteihin menetelmiin vetytaloudessa. Luento saattaa tuntua viihteelliseltä, mutta toivottavasti se tukee oppimista. Edutainment.*

Kineettinen kaasuteoria – Paineen ja lämpötilan muodostuminen erityyppisissä kaasuissa: ideaali- ja reaalikaasut: yksiatomiset, kaksiatomiset ja moniatomiset kaasut, Daltonin osapainelaki, van der Waals-kaasu, kriittinen paine ja lämpötila, nesteytymistä lähellä oleva kaasun tila

Kemiallisten reaktioiden energia: Entalpia ja Gibbsin energia. Entalpian additiivisuus reaktioyhtälöissä. Termodynaaminen entalpia ja entalpian muotoja.

Kaasuteorian näkökulmasta vety on vain yksi kaasuista

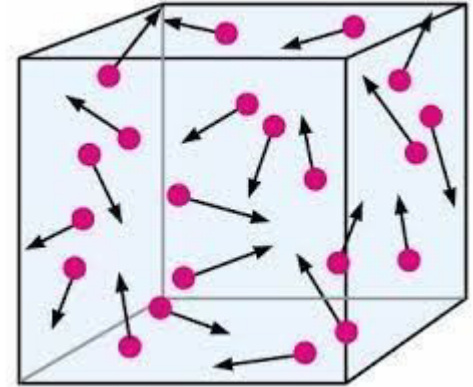
Vety ja vetyjohdannaiset poikkeavat neste- ja kaasutilassa huomattavasti



ominaisuuksiltaan muista polttoaineista.

Tämän vuoksi tutustumme **kineettiseen kaasuteoriaan, reaktioentalpiaan ja termodynamiikkaan.** Se

auttaa ymmärtämään laskennallisesti kaasuja, yhdisteiden muodostumista ja reaktioiden energian laskentaa.

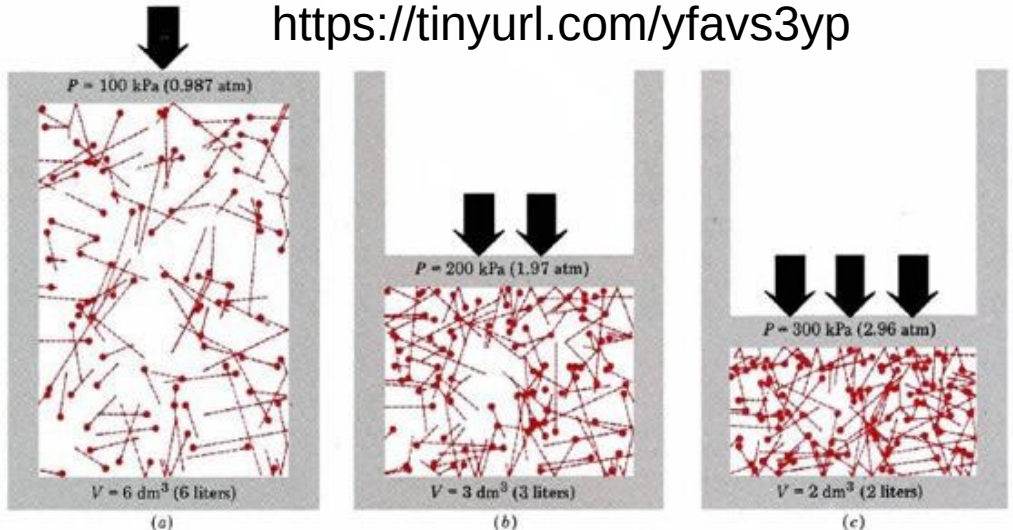


Kuva esittää kineettisestä kaasuteoriasta johdettavia joitakin fysikaalisia ilmiöitä

Kaasujen kineettinen teoria

Kaasujen kineettinen teoria on yksinkertaistus kaasujen termodynaamisesta käyttäytymisestä. Malli kuvaa kaasua suurena joukkona identtisiä submikroskooppisia hiukkasia (atomeja tai molekyylejä), jotka ovat kaikki jatkuvassa, nopeassa ja satunnaisessa liikkeessä. Molekyyliin koon oletetaan olevan paljon pienempi kuin

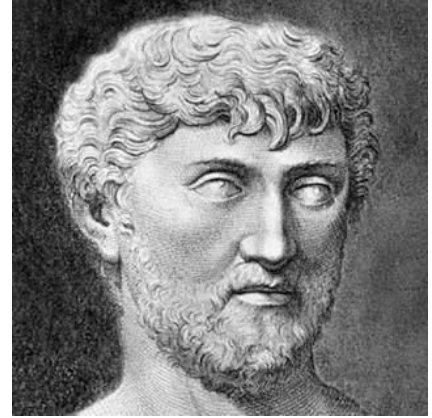
<https://tinyurl.com/yfavs3yp>



hiukkasten keskimääräinen etäisyys toisistaan. Hiukkaset törmäävät satunnaisesti elastisesti keskenään sekä säiliön seinämiin. Mallin perusversio kuvaa ideaalikaasua eikä huomioi muita hiukkasten välisiä vuorovaikutuksia.

Historiaa

N. 50 eaa. roomalainen filosofi Lucretius ehdotti, että makroskooppiset kappaleet koostuvat liikkuvista atomeista. Tätä näkemystä ei juuri huomioitu seuraavina vuosisatoina Aristoteleen ajatusten hallitessa.



1738 Daniel Bernoulli julkaisi "Hydrodynamican", joka muodosti perustan kaasujen kinemaattiselle teorialle. Hän esitti, että kaasut koostuvat molekyyleistä ja niiden törmäykset aiheuttavat painetta. Teoriaa ei heti hyväksytty, koska energian säilymistä ei ollut vielä vahvistettu.

Kohti kineettistä ja tilastollista ja teoriaa

Kaasuteorian aatehistoria ja kehittyminen 1700-luvusta nykyaikaan

John Dalton (1766-1844): Daltonin atomiteoria oli vallankumouksellinen, sillä se esitti, että eri alkuaineiden atomit eroavat toisistaan massaansa ja ominaisuuksiinsa perustuen. Hän määritteli myös kaasujen moolin käsitteen ja esitti Daltonin lain, joka kuvaa paineen vaikutusta kaasuun. Tämä loi perustan modernille mooliteorialle ja atomien roolin ymmärtämiselle kemiallisissa reaktioissa.

Amedeo Avogadro (1776-1856): Avogadro esitti kuuluisan Avogadron lain, joka sanoo, että samassa lämpötilassa ja paineessa yhtä suuret moolimäärät kaasua sisältävät yhtä monta molekyyliä. Hän esitti myös tärkeän ajatuksen, että atomit



yhdistyvät tietyissä kiinteissä suhteissa kemiallisissa reaktioissa, mikä johti stoikiometrian kehittymiseen.

Mikhail Lomonosov (1711-1765): Lomonosov oli edelläkävijä kaasujen fysikaalisessa tutkimuksessa. Hän huomasi, että kaasu voi laajentua ja puristua, ja hänellä oli ajatuksia kaasun tiheyden ja kaasumolekyylien liikkeen välisestä suhteesta.

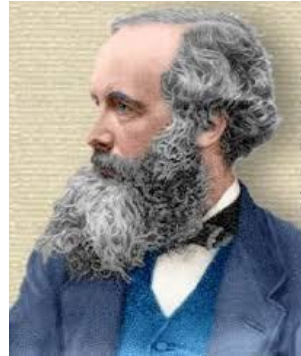
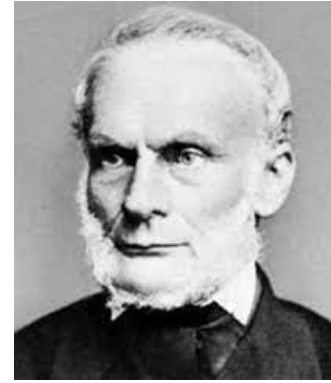
Georges-Louis Le Sage (1724-1803): Le Sagen teoria perustui siihen, että kaasu koostuu pienistä hiukkasista, jotka liikkuvat ja aiheuttavat painetta. Hän yritti selittää kaasun tilavuuden ja paineen suhdetta tällä teorialla, mutta se ei saanut laajaa hyväksyntää aikansa tiedeyhteisössä.

August Krönig (1822-1879): Krönig esitteli yksinkertaisen kaasumallin vuonna 1856, joka oli yritys selittää kaasujen käyttäytymistä tilavuuden ja paineen perusteella. Vaikka tämä malli oli yksinkertainen, se oli askel kohti monimutkaisempia malleja.

Rudolf Clausius (1822-1888): Clausius kehitti vuonna 1857 monimutkaisemman kaasumallin, joka otti huomioon myös molekyylien pyörivän ja värähtelevän liikkeen.

Hän teki merkittäviä panoksia termodynamiikkaan ja kinetiikkaan. **Albert Einstein (1879-1955):** Einsteinin ja Smoluchowskin työt vuonna 1905 selittivät Brownin liikkeen, joka oli havainto hiukkasista satunnaisesti liikkumassa nestemäisessä liuoksessa. He osoittivat, että tämä liike johtui atomien olemassaolosta ja niiden satunnaisesta liikkeestä, mikä vahvisti atomiteoriaa.

Ludwig Boltzmann (1844-1906): Boltzmann yleisti Maxwellin ja muiden panoksia ja loi perustan statistiselle mekaniikalle. Hän esitti Boltzmannin yhtälön, joka kuvaa entropian kasvua ja toi yhteen statistisen mekaniikan ja termodynamiikan käsitteet, mikä oli tärkeä edistysaskel kaasujen käyttäytymisen ymmärtämisessä.



August Krönig, Rudolf Clausius, J.
Maxwell, Mariam Smoluchowski

Kohti tilastollista ja kineettistä teoriaa - Ideaalikaasumallin oletukset määräävät ideaalikaasun ominaisuudet

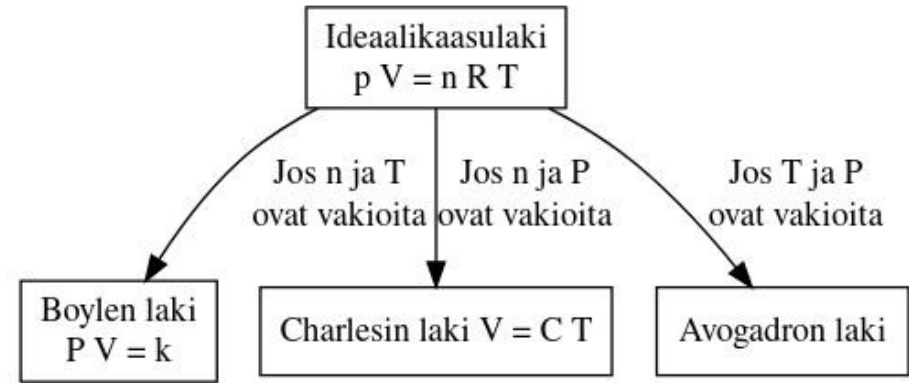
Kaasu koostuu erittäin pienistä hiukkasista, joiden tilavuus on merkityksetön verrattuna säiliön tilavuuteen.

Hiukkasten määrä on niin suuri, että tilastollinen käsittely on perusteltua.

Hiukkaset törmäävät jatkuvasti toisiinsa ja säiliön seiniin. Kaikki törmäykset ovat täysin elastisia. Törmäysten ulkopuolella molekyylien väliset vuorovaikutukset ovat merkityksettömiä.

Hiukkasten liike voidaan kuvata klassisilla laeilla ja ne ovat aikareversiivisiä. Yleisesti oletetaan hiukkasten olevan samanmassaisia, mutta teoriaa voidaan yleistää eri massaisille hiukkaille Daltonin lain mukaisesti. Yksinkertaisin malli on ideaalikaasu, jossa oletetaan molekyylien pistemäisyys, eikä rotaatioenergiaa varastoidu kaasuun. Ideaalikaasu ei lämpene puristettaessa.

Tarkemmissa malleissa oletuksia on täydennetty ja ne perustuvat Boltzmannin yhtälöön, joka kuvaa tiheiden kaasujen ominaisuuksia huomioiden hiukkasten tilavuuden ja tilastollisen nopeusjakauman sekä molekyylien välisten konstitutiivisten voimien aikaansaamat ominaisuudet. Esimerkkinä minimitilavuuksinen van der Waals kaasu, joka on hyvin yksinkertainen reaalikaasun malli.



Ideaalikaasun malli

Kineettisessä kaasuteoriassa *paineen oletetaan vastaavan sitä voimaa per pinta-ala, jota elastiset atomit törmätessään edestakaisin kaasusäiliön pintaan vastaavat*. Oletetaan suuren määrän N molekyyliä, joiden kunkin massa on m , törmäävän kuutiollisessa säiliössä $V = L^3$. Törmätessään seinään x kohtisuoraan nopeudella v_x syntyy impulssi

$$dp = 2 m v_x \quad \text{ajassa}$$

$dt = 2 L / v_x$ jonka välin edestakaisin liikkuminen kestää. Voima, jonka 1. molekyylin törmäys synnyttää on

$$F = dp / dt = 2mv_x / (2L/v_x) = mv_x^2 / L$$

joten kaikkien molekyylien N paine päädyssä $A_x = L^2$

$$p = F / L^2 = Nm v_x^2 / L^3$$

Koska molekyylien liike ja suunta on täysin satunnainen, on niiden suuntien komponenttien neliölliset suunnat yhtäsuuret, $v_x^2 = v_y^2 = v_z^2$ ja Pythagoraan lauseen mukaan voimme kirjoittaa

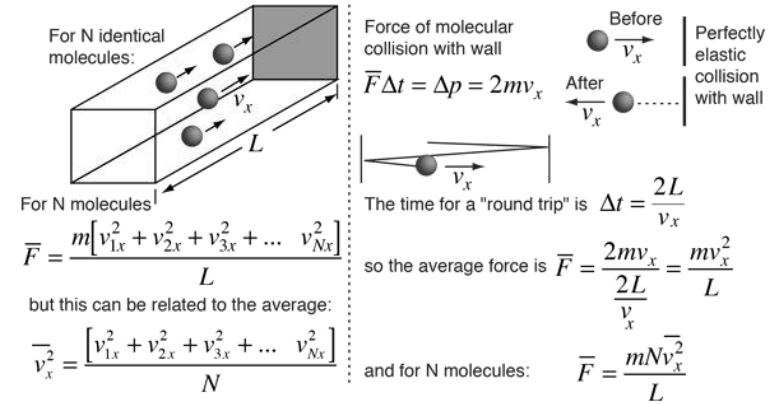
$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = 3 v_x^2 \quad \text{ja näin ollen tilavuuden } V \text{ kineettinen energia } E_t \text{ johtuen molekyylien translatiivisesta}$$

liikkeestä on *Lähteestä*:

$$E_t = 1/2 N m v^2$$

$$E_p = p V = N m v^2 / 3$$

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Kinetic/kinthe.html> ja paine-energia aiemmasta johtaen samassa tilavuudessa $E_p = p V$ on



<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/>

eli kineettinen energia on $3/2$ osaa paine-energiasta. Tämä tärkeä tulos, sillä se kytkee kaasun kineettisen energian, mikroskooppisen ominaisuuden paineeseen, makroskooppiseen ominaisuuteen, eli molekyylien liike-energia on $3/2$ osaa paine-energiasta tilavuudessa pV . Tulos kytkee kaasun kineettisen energian, mikroskooppisen ominaisuuden paineeseen, makroskooppiseen ominaisuuteen.

Sijoittamalla paine-energian yhtälöön ainemäärän ja molekyyli-massan suhde $m = nM$ ja tiheyden ja tilavuuden suhde $\rho = m/V = nM/V$ saadaan

$$E_p = p nM / \rho = 2/3 p V_v, \text{ josta } p = 2/3 \rho v^2$$

Eli saadaan yhtälö ideaalikaasun paineen, tiheyden ja nopeuden välille. Tästä saadaan äänen nopeuden yhtälö.

Ideaalikaasun yhtälö

Kineettinen energia ja lämpötila

Kirjoittamalla paine-energian yhtälö muotoon

$$pV = N k T,$$

missä $N = 6,022 \cdot 10^{23}$ on Avogadron luku, joka kuvaa kuinka monta molekyyliä on yhdessä moolissa ainetta. (Mooli alkuainetta X painaa y atomipainon verran grammoissa.) $k = 1.380649 \cdot 10^{-23}$ J/K on Boltzmannin vakio joka kertoo kuinka paljon lämpöä per Kelvin on yhdessä molekyylissä, jos sen atomipaino olisi yksi. Näin saadaan laskettua ideaalikaasuvakio

$$R = N k = 8,314 462 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ ja paineyhtälö voidaan kirjoittaa käyttökelpoisempaan muotoon}$$

$pV = nRT$, missä n = ainemäärä mooleissa ja edelleen T on lämpötila Kelvineissä, $T = 0K = -273.15C$. Koska ainemäärä on $n=m/M$ saadaan

$pV = mRT/M$, missä M =kaasun molekyyli massa. Kaasulla on tilavuus ρ ja Volyymi V , joten tiheysyhtälöksi saadaan

$\rho = m/V$, josta saadaan jakamalla V pois molemmin puolin =>

$\rho = pM/RT$. ja siitä vastaavasti paineeksi $p = RT/\rho M$

Näin saatiin ideaalikaasun malli käyttökelpoiseen muotoon. Ideaalikaasu energia on täysin translatiivista ja se ei sisällä lainkaan sisäistä rotaatio- tai sidosenergiaa.

Tehtäviä

1. Johda yksiaineisen ideaalikaasun tiheyden kaava paineen ja lämpötilan ja molekyyli massan funktiona.

2. Laske ilman tehollinen molekyylimassa, jos ilmassa on 21% happea ja 78% typpeä, ja lopulla ei ole väliä. Käytä alkuainetaulukkoa. Wiki.
3. Laske ilmanpaine, jos ilman tiheys on 1.29 kg/m ja lämpötila 0 C. Käytä 2. tehtävän mukaista molekyylimassaa.

Daltonin laki

Daltonin osapainelaki sanoo, että reagoimattomien kaasujen kokonaispaine p on osapaineiden summa.

$$p = \sum_{i=1}^n p_i$$

Missä p_i on kunkin kaasukomponentin osapaine. Daltonin osapainelaki on täsmällisesti voimassa vain ideaalikaasulle. Reaalikaasuissa voi olla erilaisia sisäenergiasuhteita sisältäviä

komponentteja (rotaatio jne), jotka muuttavat osapaineiden suhdetta.

Mooliosuus

Daltonin osapainelaki määrittelee myös kaasuseoksen moolimäärän suhdelukuina. Mooliosuus x_i on tietyn komponentin moolimäärä n_i jaettuna koko seoksen moolimäärällä n :

$$x_i = \frac{n_i}{n}$$

Täten kunkin osakomponentin paine p_i on mooliosuuden n_i mukainen:

$$p_i = n_i p$$

Tilavuuskonsentraatio

Edelleen voidaan johtaa, että kunkin kaasukomponentin osapaine p_i on tämän

komponentin konsentraatio c_i kertaa kokonaispaine.

$$p_i = p c_i$$



John Dalton (1766-1844), englantilainen kemisti ja fyysikko. John Daltonilla oli punavihreä värisokeus. Hän oli yksi ensimmäisistä henkilöistä, jotka kuvasivat värisokeutta tieteellisesti. Sairaus vaikutti hänen kykyynsä erottaa värejä, erityisesti punaista ja vihreää, mutta ei estänyt häntä tekemästä merkittäviä tieteellisiä havaintoja ja kehittämästä atomiteoriaansa, joka oli vallankumouksellinen käänne kemian historiassa.

Van der Waalsin kaasuyhtälö

Van der Waalsin yhtälö on ideaalikaasusta laajennettu yksinkertainen reaalikaasujen tilanyhtälö. Se on Johannes van der Waals kehittämä vuonna 1873. Yhtälö ottaa ideaalikaasujen tilanyhtälöä paremmin huomioon reaalikaasujen ominaisuudet, kuten molekyylien koon ja kaasumolekyylien väliset Van der Waalsin vuorovaikutukset.

Tilavuuskorjaus

Yhtälö laajentaa ideaalikaasun mallia olettamalla, että on olemassa pienin ainemäärään verrannollinen kokoonpuristumaton tilavuus nb , jota pienemmäksi kaasu ei puristu (yleensä nestetilavuus), joten paineeksi muodostuu korjattu paine p' laajennetussa yhtälössä $p'(V - nb) = nRT$

Vuorovaikutuspainekorjaus sekä molekyylien ollessa lähellä toisiaan ne vetävät toisiaan puoleensa (erottumisenergia) joka on verrannollinen konsentraation neliöön

$$p = p' - a \left(\frac{n}{V} \right)^2$$

Johannes Diderik van der Waals (1837-1923) oli hollantilainen fyysikko ja kemisti, joka tunnetaan erityisesti Van der Waalsin kaasuyhtälöstä ja työstään kaasujen tilavuuden ja nestemäisen

Joten ideaalikaasun yhtälö voidaan täydentää muotoon

käyttäytymisen ymmärtämisessä.

$$\frac{n^2}{V^2}$$

Fyysikko-kemistinä. Hän opiskeli aluksi opettajaksi, mutta päätti ($p' - a \left(\frac{n}{V} \right)^2 \right) (V - nb) = nRT$ jatkaa opintojaan itsenäisesti ja syventyi matematiikkaan, fysiikkaan V ja kemiaan. Hänen omistautumisensa tieteelle ja omatoimiseen

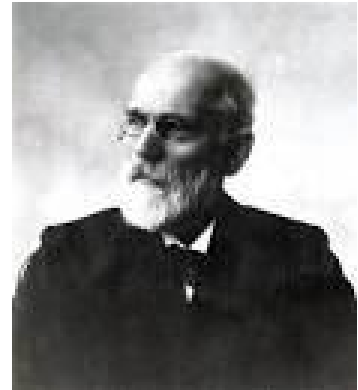
Van der Waalsilla ei ollut virallista akateemista koulutusta

Tekemällä sijoitukset $\rho = nM / V$ voidaan malli kirjoittaa muotoon oppimiseen johtivat siihen, että hänestä tuli yksi merkittävimmistä fysikaalisen kemian tutkijoista. Hänen nimensä on edelleen

läheisesti yhdistetty kaasujen käyttäytymisen ymmärtämiseen,

$$\left(p' - a \left(\frac{\rho}{M} \right)^2 \right) \left(\frac{M}{\rho} - b \right) = RT$$

ja hän sai Nobelin kemianpalkinnon vuonna 1910.



Kriittisen pisteen laskemisessa on otettava huomioon, että van der Waalsin malli on kuutiollinen ja lämpötilan ja tiheyden noustessa yli kriittisen pisteen, **malli mukaan** kaasun **paine ja tilavuus pienisi yhtä aikaa mikä ei ole mahdollista**, vaan kaasun tila on hyvin epävakaata. Tällä alueella vdW-yhtälö ei pidä paikkaansa. Katso tarkasti seuraavan kalvon kaaviota.

Van der Waalsin kaasuyhtälön identifiointi



Van der Waalsin kaasumallin isotermiset käyrät. Kaasumalli kuvaa paineen hyvin niin ideaalikaasuna kuin suuressa tiheydessä lähellä nesteytymistä. Hankaluutena on kuitenkin kaksifaasiaalue, jossa paine ei seuraa laskevaa käyrää, vaan todellisuudessa osa materiaalista on kaasuna ja nesteenä ja paine transitiossa pysyy vakiona.

Lähde: www.tec-science.com

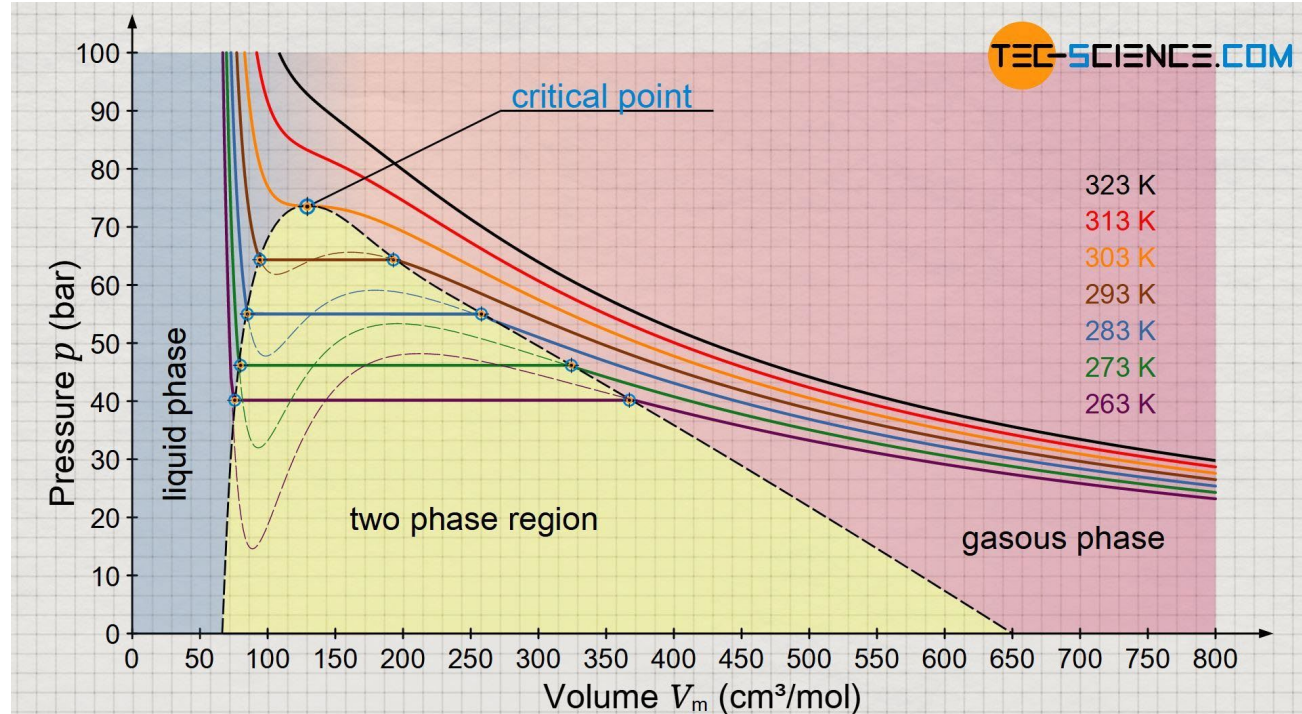
Tuntemalla mallin kertoimet a ja b voidaan derivoimalla johtaa kriittisen pisteen paine p_c , moolitilavuus v_c ja lämpötila T_c .

$$p_c = \frac{a}{27b^2}, v_c = 3b, ja T_c = \frac{8a}{27bR}$$

Mallin virittäminen: Vastaavasti, jos kaasun kriittinen lämpötila ja paine tunnetaan, voidaan laskea mallin kertoimet a ja b :

$$b = \frac{27 R^2 T_c^2}{64 p_c}$$

RT_c



$a =$

$8 p_c$

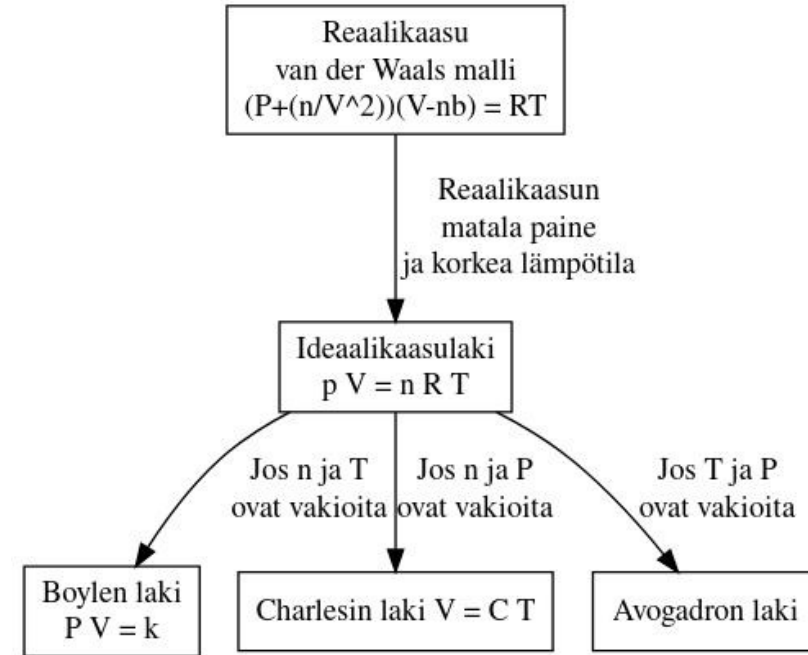
Van der Waalsin kaasuyhtälö ominaisuuksia

Karakteristiikka: VdW yhtälö kuvaa ideaalikaasua paremmin reaalikaasun ominaisuuksia olettamalla kaasulla olevan pienin kokoonpuristumaton tilavuus, kun termi $(V - nb) = 0$, eli $V = nb$

Virittäminen: Kun kaasun kriittinen lämpötila T_c ja paine p_c tunnetaan, voidaan b laskea. Ideaalikaasun yhtälöstä voidaan tämän jälkeen kaasun suurin mahdollinen tiheys ρ , johon kaasu voi nesteytyessään puristua.

Kriittinen piste: Van der Waalsin kaasuyhtälöllä on kriittinen piste, joka kuvaa korkeinta lämpötilaa ja painetta, joissa kaasu voi olla kaasumainen ja nestemäinen samanaikaisesti. Tämä piste on tärkeä fyysisissä ja kemiallisissa sovelluksissa.

Yhtälön käyttötilanteet: Van der Waalsin kaasuyhtälö on erityisen hyödyllinen suurilla paineilla ja matalilla lämpötiloilla, kuten nesteytetyn kaasun ja korkeapainekaasujen kuvaamisessa. Se korjaa idealisoitujen kaasulakien rajoitukset tällaisissa ääriolosuhteissa.



Yksinkertaistukset: Vaikka Van der Waalsin kaasuyhtälö parantaa ideaalikaasulakia, se tekee silti joitakin yksinkertaistuksia, kuten olettamuksen, että molekyylit ovat pisteitä ja että ne eivät hylkää toisiaan. Nämä yksinkertaistukset voivat vaikuttaa tarkkuuteen tietyissä tilanteissa.

Useiden kaasujen kuvaaminen: Van der Waalsin kaasuyhtälöä voidaan soveltaa moniin kaasuihin, mutta seoksessa kullekin kaasulle on määritettävä omat vakionsa a ja b , jotka perustuvat kriittisiin parametreihin.

Tehtäviä

Nämä varmaan tuli jo tehtyä? Ellei, Repetitio Est Mater Omnium Studiorum! :)

1. Johda yksiaineisen ideaalikaasun tiheyden kaava paineen ja lämpötilan ja molekyylimassan funktiona.
2. Laske ilman tehollinen molekyylimassa, jos ilmassa on 21% happea ja 78% typpeä, ja lopulla ei ole väliä. Käytä alkuainetaulukkoa. Wiki.
3. Laske ilmanpaine, jos ilman tiheys on 1.29 kg/m ja lämpötila 0 C. Käytä 2. tehtävän mukaista molekyylimassaa.

Haasteellisempaa:

- Laske molekyylien keskimääräinen nopeus ilmalle kaasuteorian mukaan
- Pohdi, miten arvioisit happi- ja typpimolekyylien erilliset keskimääräiset nopeudet
- Tutustu Daltonin lakiin. Olisiko tästä apua?
- Johda van der Waals-mallin kaasun tiheyden kaava kuten 1.
- Viritä vdW:n a ja b kaksiatomiselle vedylle. Katso wikipediasta kriittinen paine ja lämpötila.

Yleistetty van der Waalsin yhtälö

van der Waalsin malli (vdW) on heikko kuvaavaan kaasujen käyttäytymistä nesteytymisen lähellä johtuen mainitusta kaksifaasitilasta. Tilan puutteen vuoksi lukijaa kehoitetaan myöhemmin, kurssin jälkeen, jos tarve vaatii, tutustumaan näihin parannettuihin malleihin, jotka varmasti riittävät



Redlich-Kwong-Soave
Korjauskerrointarkennuksia
Redlich-Kwong malliin

$$RT/(v\{m\}-b)-a\alpha/(v\{m\}\{m\}+b)$$

...

Tiede
jatkuu..

Hyvä hyöry-neste
tasapaino
{ } = alaindeksi

Peng-Robinson
Kriittiset ominaisuudet &
puristettavuus

$$p = RT/(v\{m\}-b) - a\alpha/(v\{m\}^2+2bv\{m\}-b^2)$$

...

Redlich-Kwong

$$p = RT/(v-b)-a/(T^{0.5}v(v-b))$$

$$a = \Omega\{a\}R^2T\{c\}^2.5/pc$$

$$b = \Omega\{b\}RT\{c\}/p\{c\}$$

Kriittiset ominaisuudet
ja kokoonpuristuvuus

Hyvä monifaasi
heikompi nestemalli

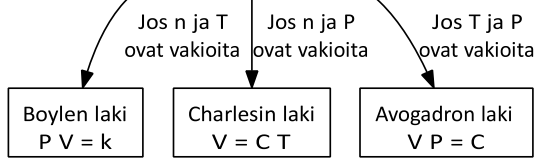
Reaaliikaasu
van der Waals malli

$$(P+(n/V^2))(V-nb) = RT$$

Reaaliikaasun
matala paine
ja korkea lämpötila

Idealiikaasulaki

$$pV = nRT$$



tarkimpiinkin suunnittelutehtäviin. Esim [1] Lebowitz ja Penrose osoittivat aineen faasimuutoksen perustuen van der Waalsiin. Tässä yhtälön tarkkuutta puhtaiden aineiden ja seoksien termodynaamisten ominaisuuksien ennustamisessa. Tunnetuimmat muunnokset vdWtilanyhtälöstä ovat [2] Soave-Redlich-Kwong (SRK), [3] Peng- Robinson kuutiolliseen tilayhtälöön (PR) (Peng ja Robinson), ja [4] Patel-Teja (PT) (Patel ja Teja) -tilanyhtälöt. Monet tutkijat ovat tehneet lukuisia muutoksia näihin yhtälöihin, ja **myös jopa pelkän van der Waalsin yhtälön tutkiminen jatkuu yhä.**

1. Elliott Lieb; Quantum-Mechanical Extension of the Lebowitz-Penrose Theorem on the Van Der Waals Theory. J. Math. Phys. 1 June 1966; 7 (6): 1016-1024. <https://doi.org/10.1063/1.1704992>
2. https://en.wikipedia.org/wiki/Redlich%E2%80%93Kwong_equation_of_state
3. https://en.wikipedia.org/wiki/Cubic_equations_of_state
4. Pradnya N.P. Ghoderao, Mohan Narayan, Vishwanath H. Dalvi, Hun Soo Byun, Patel-Teja cubic equation of state – A review of modifications and applications till 2022, Fluid Phase Equilibria, Volume 567, 2023, 113707, ISSN 0378-3812, <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2022.113707>.(<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381222003260>)

Reaktioyhtälöt, Entalpia ja Gibbsin energia

Entalpia ja Gibbsin energia

Entalpia ja Gibbsin energia ovat termodynaamisia suureita, joiden avulla voidaan laskea tietyn kemiallisten reaktion termodynamiikkaa. Niiden avulla voidaan selvittää, kuinka ja miksi kemialliset reaktiot tapahtuvat tietyssä lämpötilassa ja paineessa. Entalpia ja Gibbsin energian yksikkö on Joule [J] = [Nm].

Entalpia (H):

Entalpia on termodynaaminen tila-funktio, joka ilmaisee järjestelmän kokonaisen energian, joka sisältää sekä sisäisen energian että paine-energian.

Reaktioyhtälössä entalpiaa käytetään kuvaamaan reaktion lämmönvaihtoa. Reaktion entalpia (ΔH) voi olla positiivinen (endotermiselle reaktiolle) tai negatiivinen

(eksotermiselle reaktiolle). Positiivinen ΔH tarkoittaa, että reaktio vaatii lämpöä (energiaa), kun taas negatiivinen ΔH tarkoittaa, että reaktio vapauttaa lämpöä.

Entalpia fysikaalisesti: kuinka energiaa vapautuu tai sitoutuu fysikaalisessa muutoksessa

Sulamisen entalpia määritellään entalpien muutoksena, joka vaaditaan yhden moolin aineen tilan muuttamiseen täysin kiinteästä nesteeseen.

Kaasun muodostumisen entalpia määritellään entalpien muutoksena, joka vaaditaan yhden moolin aineen tilan muuttamiseen täysin nesteestä kaasuksi.

Sublimaation entalpia määritellään entalpien muutoksena, joka vaaditaan yhden moolin aineen tilan muuttamiseen täysin kiinteästä kaasuksi.

Ristikytkentäentalpia määritellään energiana, joka vaaditaan yhden moolin ionisen yhdisteen erottamiseen erillisiksi kaasumaisiksi ioneiksi äärettömän etäisyyden päähän (ilman vetovoimaa). **Sekoittumisen entalpia** määritellään entalpien muutoksena, joka tapahtuu kahden (ei-reaktoivan) kemiallisen aineen sekoittuessa.

Entalpia kemiallisesti: kuinka energiaa vapautuu tai sitoutuu kemiallisessa muutoksessa

Reaktion entalpia määritellään entalpian muutoksena termodynaamisen järjestelmän osassa, kun yksi mooli ainetta reagoi täysin. **Muodostumisen entalpia** määritellään entalpian muutoksena termodynaamisen järjestelmän osassa, kun yksi mooli yhdistettä muodostuu sen elementaarisista esiasteista. **Palamisen entalpia** määritellään entalpian muutoksena termodynaamisen järjestelmän osassa, kun yksi mooli ainetta palaa täysin hapen kanssa. **Hydrogenoinnin entalpia** määritellään entalpian muutoksena termodynaamisen järjestelmän osassa, kun yksi mooli tyydyttymätöntä yhdistettä reagoi täysin ylimääräisen vetyä kanssa muodostaen tyydyttyneen yhdisteen. **Atomisoinnin entalpia** määritellään entalpian muutoksena, joka vaaditaan yhden moolin aineen jakamiseen sen koostumukselliseksi atomeiksi täysin. **Neutraloinnin entalpia** määritellään entalpian muutoksena termodynaamisen järjestelmän osassa, kun yksi mooli vettä muodostuu happaman ja emäksen reagoidessa. **Standardi liukenemisen entalpia** määritellään entalpian muutoksena termodynaamisen järjestelmän osassa, kun yksi mooli liuetettavaa ainetta liukenee täysin ylimääräiseen liuottimeen niin, että liuos on äärettömän laimennettu. **Standardi denaturoitumisen entalpia (biokemia)** määritellään entalpian muutoksena, joka vaaditaan denaturoimaan yksi mooli yhdistettä. **Hydraation entalpia** määritellään entalpian muutoksena, joka havaitaan, kun yksi mooli kaasumaisia ioneja liukenee täysin veteen muodostaen yhden moolin vesiliuoksia.

Gibbsin energia vakio-olosuhteissa (NTP) on Entalpia

Gibbsin energia (G):

Gibbsin energia on toinen termodynaaminen tila-funktio, jonka avulla voidaan määrittää, onko jokin reaktio spontaani vallitsevissa olosuhteissa.

Gibbsin energia on yhteydessä entalpiaan, entropiaan (S) ja lämpötilaan (T) seuraavan kaavan avulla: $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$

ΔG ilmaisee, onko reaktio spontaani tietyissä olosuhteissa:

$\Delta G < 0$: Reaktio on spontaani (energia vapautuu).

$\Delta G > 0$: Reaktio ei ole spontaani (energiaa tarvitaan).

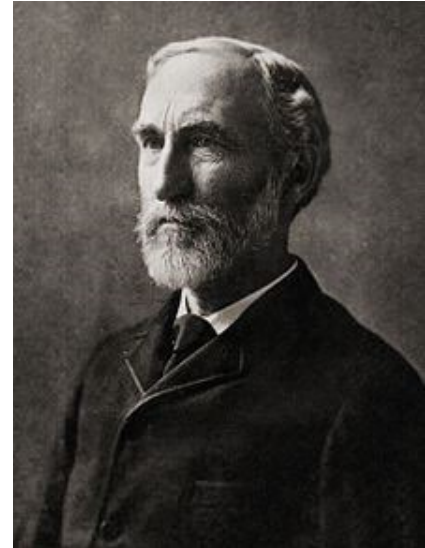
$\Delta G = 0$: Reaktio on tasapainossa ja ei siirry eteen- eikä taaksepäin.

Entalpia kuvaa reaktion lämpöenergian muutosta, kun taas Gibbsin energia kertoo, onko reaktio spontaani annetun lämpötilan ja paineen vallitessa. Entalpia ja Gibbsin vapaa energia auttaa ennustamaan reaktioiden suuntaa ja olosuhteita, joissa ne tapahtuvat.

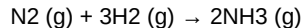
Entalpien laskeminen

Entalpien laskeminen

Reaktioyhtälön entalpien (ΔH) laskeminen määrittää, kuinka paljon lämpöä energiaa vapautuu tai sitoutuu reaktion aikana. Tämä voidaan tehdä käyttämällä Hessin lain periaatetta ja tietäen mukana olevien aineiden ja reaktioiden entalpiamuutokset. Lasketaan reaktioyhtälön avulla, kuinka paljon entalpia muuttuu vety- ja typpikaasun reagoitessa keskenään:



Typpi-vetykaasureakto:



Aloita määrittämällä jokaisen reaktantin ja tuotteen entalpian (ΔH_f). Nämä arvot ovat tietokannoissa ja voivat olla eri lähteistä riippuen, mutta ne ovat olennaisia reaktion entalpian laskemiseksi. Standardientalpiamuutokset (ΔH_f) ovat tavallisesti ilmoitettu kJ/mol-yksikköinä.

Esimerkiksi:

$\Delta H_f(\text{N}_2) = 0 \text{ kJ/mol}$ (Typpi kaasuna std-olosuhteissa)

$\Delta H_f(\text{H}_2) = 0 \text{ kJ/mol}$ (Vetykaasu standardiolosuhteissa)

$\Delta H_f(\text{NH}_3) = -45.9 \text{ kJ/mol}$ (Ammoniikki std-olosuhteissa)

Nyt voimme käyttää näitä entalpiamuutoksia määrittämään reaktion ΔH .

$$\Delta H = \sum \Delta H_f(\text{tuotteet}) - \sum \Delta H_f(\text{reaktantit})$$

$$\Delta H = [2 \Delta H_f(\text{NH}_3)] - [1 \Delta H_f(\text{N}_2) + 3 \Delta H_f(\text{H}_2)]$$

$$\Delta H = [2 (-45.9 \text{ kJ/mol})] - [1 (0 \text{ kJ/mol}) + 3 (0 \text{ kJ/mol})]$$

$$\Delta H = [-91.8 \text{ kJ/mol}] - [0 \text{ kJ/mol}]$$

$$\Delta H = -91.8 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H = -91.8 \text{ kJ/mol}$$

Joten typpi-vety reaktion entalpia (ΔH) on -91.8 kJ/mol .

Tämä tarkoittaa, että reaktio vapauttaa 91.8 kJ lämpöä jokaista kahta moolia ammoniakkia kohti, kun reaktio etenee standardiolosuhteissa. Negatiivinen merkki osoittaa, että reaktio on eksotermiini, mikä tarkoittaa, että se vapauttaa lämpöä ja on yleensä spontaani suotuisissa olosuhteissa.

Entalpia ja Hessin laki: Entalpia on tilafunktio, joka ei riipu polusta alku- ja lopputilkan välillä

Entalpia ja Hessin laki Entalpia on tilafunktio, joten se riippuu järjestelmän alku- ja lopputilasta, ei siitä millä tavoin alkutilasta päästään lopputilaan. Tämä periaate on tunnetaan Hessin (1840) lakina. Hessin lain mukaan Tämän lain avulla reaktion entalpia saadaan jakamalla reaktio osareaktioihin ja laskemalla yhteen niiden entalpiat. Näin helposti mitattavissa olevaa entalpian muutoksen avulla voidaan määrittää toisen reaktion vaikeasti mitattavaa reaktioentalpiaa osareaktioita ynnäämällä. Additiivisuus perustuu siihen, että entalpia on tilafunktio, eikä riipu polusta. Sama pätee myös Hessin lakiin ja entropioihin.

Germain Henri Hess oli venäläinen kemisti, joka syntyi Genevessä, Sveitsissä, vuonna 1802 ja kuoli Pietarissa vuonna 1850. Hess syntyi Sveitsissä, mutta muutti nuorena Venäjälle, jossa hän vietti suurimman osan elämästään ja urastaan. Hänen isänsä oli alkuperäiseltään saksalainen ja hänen äitinsä oli ranskalainen.

Vaikka Hess valmistui alun perin lääketieteestä Moskovan yliopistossa. Hänen kiinnostuksensa kemiaan heräsi kuitenkin lääketieteen opintojen aikana, ja hän siirtyi lopulta täysipäiväisesti kemian pariin. Hessin kuuluisin tieteellinen panoksensa on "Hessin laki", joka tunnetaan myös "reaktion lämpösumman laina". Lain mukaan kemiallisen reaktion kokonaisentalpian muutos on sama riippumatta siitä, tapahtuuko reaktio yhdessä vaiheessa vai useammassa välivaiheessa. Tämä laki oli yksi varhaisista termodynamiikan laeista, ja se esitettiin vuonna 1840. Hess ei keskittynyt pelkästään kemian perusteisiin; hän oli myös kiinnostunut geologiasta. Hän tutki muun muassa mineraalien muodostumista ja vuorikristallien

Entropia

Entropian klassinen termodynaaminen määritelmä



syntymekanismia. Poikkiteollinen lähestymistapa oli edistyksellistä tuohon aikaan. Hess toimi myös Venäjän valtion palveluksessa. Hän oli Venäjän kansallisen rahanlyöntilaitoksen kemistinä Pietarissa, tutkien metallien, erityisesti platinaryhmän metallien, ominaisuuksia.

Entropia on fysikaalinen suure, joka ilmaisee systeemin epäjärjestyksen tai satunnaisuuden määrän ja on osa toista termodynamiikan pääsääntöä. Clausiuksen määritelmän mukaan *entropia muutos suljetussa systeemissä on verrannollinen lämpömäärän muutoksen suhteeseen kyseisessä lämpötilassa*. Tämän määritelmän mukaan entropian differentiaalinen muutos dS on:

$$dS = TdQ_{rev}$$

Tässä dQ_{rev} viittaa reversiiblisti siirrettyyn lämpömäärään ja T on absoluuttinen lämpötila Kelvineissä, jossa lämmönsiirto tapahtuu. Jos prosessi on reversiibeli, entropia on tilafunktio, mikä tarkoittaa, että kokonaismuutos entropiassa palautumattomien prosessien jälkeen riippuu ainoastaan alkuperäisestä ja lopullisesta tilasta, ei siitä, miten nämä tilat saavutettiin.

Entropian klassinen määritelmä ja pV -sykli eli paineen p ja tilavuuden V tuottama työ liittyvät toisiinsa termodynamiikan ensimmäisen pääsäännön kautta, joka yhdistää työn, lämmön ja energian. Tämä sääntö voidaan ilmaista yhtälönä:

$$\Delta U = Q - W$$

Tässä ΔU on systeemin sisäenergian muutos, Q on systeemiin siirretty lämpöenergia ja W on systeemin tekemä työ. Ideaalikaasun tapauksessa työ W , joka liittyy tilavuuden muutokseen, voidaan ilmaista integraalina:

$$W = \int p dV$$

Toisen pääsäännön mukaan kokonaisenergian säilymisen lisäksi on olemassa toinenkin säilymisperiaate, joka koskee entropiaa: eristetyssä systeemissä entropia ei koskaan vähene itsestään, vaan kasvaa tai pysyy samana. Tämä on termodynamiikan toisen pääsäännön ydin, joka sanoo, että luonnollisissa prosesseissa entropia pyrkii kasvamaan kohti maksimia.

Tiivistetysti, entropian klassinen määritelmä on tapa mitata systeemin epäjärjestystä tai mikrotilojen todennäköisyyksiä ja se liittyy suoraan lämmönsiirtoon ja lämpötilaan reversiiblissä termodynaamisessa prosessissa. pV-syklin työ ja kokonaisenergia taas liittyvät entropian käsitteeseen ensimmäisen ja toisen termodynamiikan lain kautta, jossa ensimmäinen lain mukaan energia säilyy ja toisen lain mukaan entropia joko kasvaa tai pysyy samana eristetyssä systeemissä.

Gibbsin vapaa energia

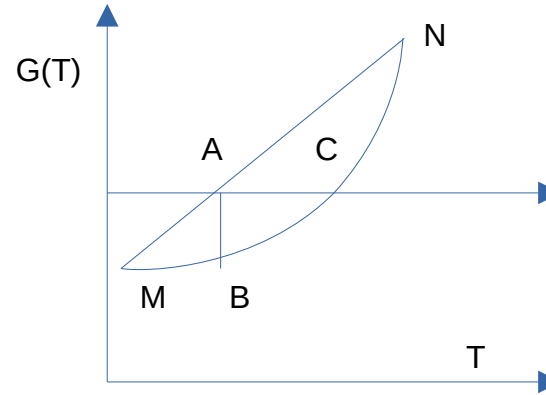
Gibbsin vapaa energia G on se lämpödynaaminen potentiaali, jota voidaan käyttää tekemään maksimaalinen määrä työtä, paine- ja tilavuustyö pois lukien, jonka termodynaamisesti suljettu järjestelmä voi tehdä vakio lämpötilassa ja paineessa. Tämä ylimäärä on ko. olosuhteiden spontaanien lämpöprosessien välttämätön ehto. Gibbsin vapaaenergia ilmaistaan kaavalla $G(p, T) = U + pV - TS = H - TS$

missä p on paine, T on lämpötila, U on sisäenergia, V on tilavuus, H on entalpia ja S on entropia.

Gibbsin vapaaenergian muutos ($\Delta G = \Delta H - T\Delta S$, mitattuna jouleina SI-järjestelmässä) on maksimaalinen määrä ei-tilavuuslaajenemistyötä, joka voidaan ottaa talteen suljetusta järjestelmästä (joka voi vaihtaa lämpöä ja työtä ympäristönsä kanssa, mutta ei ainetta) kiinteässä lämpötilassa ja paineessa. Tämä maksimi voidaan saavuttaa vain täysin palautuvassa prosessissa. Kun järjestelmä muuttuu palautuvasti alkutilasta lopputilaan näissä olosuhteissa, Gibbsin vapaaenergian vähenemä vastaa järjestelmän ympäristölleen tekemää työtä miinus painevoimien työ.

Tilan muutosta ΔG :tä voi ajatella "vapaana" tai "hyödyllisenä" energiana, joka on saatavilla ei-pV-työn tekemiseen vakio lämpötilassa ja paineessa. Yhtälöä voidaan myös tarkastella järjestelmän ja sen ympäristön yhteisnäkökulmasta. Ensiksi oletetaan, että annettu reaktio vakio lämpötilassa ja paineessa on ainoa, joka tapahtuu. Tällöin järjestelmän vapauttama tai absorboima entropia on yhtä suuri kuin ympäristön on vastaavasti absorboitava tai vapautettava entropia. Reaktio on sallittu vain, jos maailmankaikkeuden kokonaisentropian muutos on nolla tai positiivinen. Tämä heijastuu negatiivisessa ΔG :ssä, ja reaktiota kutsutaan eksergoniseksi prosessiksi.

Gibbsin energia voidaan esittää $G(T)$ -tasossa, jossa on kohtisuorassa tilavuuden V akselia vasten ja kulkee pisteen A kautta, joka edustaa kappaleen alkutilaa. MN on hajaantuneen energian pinnan osa. Polku pisteestä M pisteeseen N on tilamuutoksissa sisäenergian entropian kasvukäyrä, kun taas M :n polku N :ään on maksimaalisen entropian mukainen käyrä. Erotus AB on jäljellä oleva Gibbsin vapaa energia ja AC on jäljellä oleva vapaa entropia.



PERIODIC TABLE

Atomic Properties of the Elements

NIST National Institute of Standards and Technology
U.S. Department of Commerce

Physical Measurement Laboratory www.nist.gov/pml
Standard Reference Data www.nist.gov/srd

Group	FREQUENTLY USED FUNDAMENTAL PHYSICAL CONSTANTS [§]																Physical Measurement Laboratory www.nist.gov/pml										18																																																																											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	VIIIA	Standard Reference Data www.nist.gov/srd										2																																																																									
IA	IIA												IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA											IIA																																																																									
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	13	14	15	16	17	18	13	14	15	16	17	18	13	14	15	16	17	18																																																																			
1 H Hydrogen 1.008 1s 13.5984	2 He Helium 4.0026 1s ² 24.5874	3 Li Lithium 6.94 1s ² 2s 5.3917	4 Be Beryllium 9.0122 1s ² 2s ² 9.3227	5 B Boron 10.81 1s ² 2s ² 2p 8.2980	6 C Carbon 12.011 1s ² 2s ² 2p ² 11.2603	7 N Nitrogen 14.007 1s ² 2s ² 2p ³ 14.5341	8 O Oxygen 15.999 1s ² 2s ² 2p ⁴ 13.6181	9 F Fluorine 18.998 1s ² 2s ² 2p ⁵ 17.4228	10 Ne Neon 20.180 1s ² 2s ² 2p ⁶ 21.5645	11 Na Sodium 22.990 [Ne]3s 5.1391	12 Mg Magnesium 24.305 [Ne]3s ² 7.6462	13 Al Aluminum 26.982 [Ne]3s ² 3p 9.9859	14 Si Silicon 28.085 [Ne]3s ² 3p ² 8.1517	15 P Phosphorus 30.974 [Ne]3s ² 3p ³ 10.4867	16 S Sulfur 32.06 [Ne]3s ² 3p ⁴ 10.3600	17 Cl Chlorine 35.45 [Ne]3s ² 3p ⁵ 12.9676	18 Ar Argon 39.948 [Ne]3s ² 3p ⁶ 15.7596	19 K Potassium 39.098 [Ar]4s 4.3407	20 Ca Calcium 40.078 [Ar]4s 6.1132	21 Sc Scandium 44.956 [Ar]3d ¹ 4s 6.9615	22 Ti Titanium 47.867 [Ar]3d ² 4s 6.8281	23 V Vanadium 50.942 [Ar]3d ³ 4s 6.7462	24 Cr Chromium 51.996 [Ar]3d ⁵ 4s 6.7665	25 Mn Manganese 54.938 [Ar]3d ⁵ 4s 7.4340	26 Fe Iron 55.845 [Ar]3d ⁶ 4s 7.9025	27 Co Cobalt 58.933 [Ar]3d ⁷ 4s 7.7254	28 Ni Nickel 58.693 [Ar]3d ⁸ 4s 7.6399	29 Cu Copper 63.546 [Ar]3d ¹⁰ 4s 9.3942	30 Zn Zinc 65.38 [Ar]3d ¹⁰ 4s 9.3942	31 Ga Gallium 69.723 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p 6.9993	32 Ge Germanium 72.630 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 7.8994	33 As Arsenic 74.922 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³ 9.7884	34 Se Selenium 78.971 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴ 9.7524	35 Br Bromine 79.904 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵ 11.8138	36 Kr Krypton 83.798 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶ 13.9996	37 Rb Rubidium 85.468 [Kr]5s 4.1771	38 Sr Strontium 87.62 [Kr]5s ² 5.6949	39 Y Yttrium 88.906 [Kr]4d ¹ 5s 6.2173	40 Zr Zirconium 91.224 [Kr]4d ² 5s 6.6341	41 Nb Niobium 92.906 [Kr]4d ⁴ 5s 6.7589	42 Mo Molybdenum 95.95 [Kr]4d ⁵ 5s 7.0924	43 Tc Technetium (97) [Kr]4d ⁵ 5s ² 7.1194	44 Ru Ruthenium 101.07 [Kr]4d ⁷ 5s 7.3605	45 Rh Rhodium 102.91 [Kr]4d ⁸ 5s 7.4589	46 Pd Palladium 106.42 [Kr]4d ¹⁰ 5s 8.3369	47 Ag Silver 107.87 [Kr]4d ¹⁰ 5s 7.5762	48 Cd Cadmium 112.41 [Kr]4d ¹⁰ 5s 8.9938	49 In Indium 114.82 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p 6.7864	50 Sn Tin 118.71 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ² 7.3439	51 Sb Antimony 121.76 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ³ 6.8084	52 Te Tellurium 127.60 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴ 9.0097	53 I Iodine 126.90 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵ 10.4513	54 Xe Xenon 131.29 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶ 12.1298	55 Cs Cesium 132.91 [Xe]6s 3.8939	56 Ba Barium 137.33 [Xe]6s ² 5.2117	57 La Lanthanum 138.91 [Xe]5d ¹ 6s ² 5.1769	58 Ce Cerium 140.12 [Xe]4f ¹ 5d ¹ 6s ² 5.5386	59 Pr Praseodymium 140.91 [Xe]4f ³ 6s ² 5.4702	60 Nd Neodymium 144.24 [Xe]4f ⁴ 6s ² 5.5250	61 Pm Promethium (145) [Xe]4f ⁵ 6s ² 5.577	62 Sm Samarium 151.96 [Xe]4f ⁶ 6s ² 5.6704	63 Eu Europium 151.96 [Xe]4f ⁷ 6s ² 5.6704	64 Gd Gadolinium 157.25 [Xe]4f ⁷ 5d ¹ 6s ² 5.8638	65 Tb Terbium 158.93 [Xe]4f ⁹ 6s ² 5.9391	66 Dy Dysprosium 162.50 [Xe]4f ¹⁰ 6s ² 6.0215	67 Ho Holmium 164.93 [Xe]4f ¹¹ 6s ² 6.1077	68 Er Erbium 167.26 [Xe]4f ¹² 6s ² 6.1843	69 Tm Thulium 168.93 [Xe]4f ¹³ 6s ² 6.1843	70 Yb Ytterbium 173.05 [Xe]4f ¹⁴ 6s ² 6.2542	71 Lu Lutetium 174.97 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ² 6.4259	72 Hf Hafnium 178.49 [Xe]4f ¹⁴ 5d ² 6s ² 6.8251	73 Ta Tantalum 180.95 [Xe]4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² 7.5496	74 W Tungsten 183.84 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ² 7.8640	75 Re Rhenium 186.21 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ² 7.8335	76 Os Osmium 195.23 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ² 8.4382	77 Ir Iridium 192.22 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ² 8.9670	78 Pt Platinum 195.08 [Xe]4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹ 8.9588	79 Au Gold 196.97 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹ 9.2256	80 Hg Mercury 200.59 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 10.4375	81 Tl Thallium 204.38 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p 6.1083	82 Pb Lead 207.2 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ² 7.4167	83 Bi Bismuth 208.98 [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³ 7.2855	84 Po Polonium (209) [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴ 8.414	85 At Astatine (210) [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵ 9.3175	86 Rn Radon (222) [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶ 10.7485	87 Fr Francium (223) [Rn]7s 4.0727	88 Ra Radium (226) [Rn]7s ² 5.2784	89 Ac Actinium (227) [Rn]5f ¹ 6d ¹ 7s ² 5.3802	90 Th Thorium 232.04 [Rn]5f ¹ 6d ² 7s ² 6.3067	91 Pa Protactinium 231.04 [Rn]5f ² 6d ¹ 7s ² 5.89	92 U Uranium 238.03 [Rn]5f ³ 6d ¹ 7s ² 6.1941	93 Np Neptunium (237) [Rn]5f ⁴ 6d ¹ 7s ² 6.2655	94 Pu Plutonium (244) [Rn]5f ⁶ 7s ² 6.0258	95 Am Americium (243) [Rn]5f ⁷ 7s ² 5.9738	96 Cm Curium (247) [Rn]5f ⁷ 6d ¹ 7s ² 5.9914	97 Bk Berkelium (247) [Rn]5f ⁹ 7s ² 6.1978	98 Cf Californium (251) [Rn]5f ¹⁰ 7s ² 6.2817	99 Es Einsteinium (252) [Rn]5f ¹¹ 7s ² 6.3676	100 Fm Fermium (257) [Rn]5f ¹² 7s ² 6.50	101 Md Mendelevium (258) [Rn]5f ¹³ 7s ² 6.58	102 No Nobelium (259) [Rn]5f ¹⁴ 7s ² 6.66	103 Lr Lawrencium (266) [Rn]5f ¹⁴ 7s ² 7p 4.96

[†]Based upon ¹²C. () indicates the mass number of the longest-lived isotope.

For the most precise values and uncertainties visit ciaaw.org and pml.nist.gov/data.
NIST SP 966 (July 2019)

VIHREÄN
SIIRTYMÄN
TUOTEKEHITYS

Kiitos!

