

Συνοπτικός Εργαστηριακός Οδηγός

Εργαστήρια Φυσικοχημείας II (ΧΗΜ-444)



Καθ. Γεώργιος Φρουδάκης, Ε.Δι.Π. Νικόλαος
Στρατηγάκης και Ε.Δ.Ι.Π. Δρ. Βασίλειος
Παπαδημητρίου

Ηράκλειο, Ακαδ. Έτος: 2020-21

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

| | |
|--|----|
| Πριν το Εργαστήριο | |
| Προετοιμασία Εργαστηριακού Τετραδίου (Lab-Book) | 1 |
| Βασικές Αρχές Χρήσης Λογισμικών Προγραμμάτων Επεξεργασίας Πειραματικών Δεδομένων | 6 |
| Εργαστηριακές Ασκήσεις | |
| A01: Τάση Ατμών | 15 |
| A02: Joule - Thomson | 16 |
| A03: Θερμοχωρητικότητα Αερίων | 18 |
| B08: Θερμοχωρητικότητα Μετάλλων | 20 |
| B10: Προσδιορισμός Σταθεράς Faraday | 23 |
| B13: Ιξωδομετρία | 24 |
| Μετά το Εργαστήριο | |
| Συνοπτικός Οδηγός Συγγραφής Εργαστηριακής Αναφοράς | 26 |

Εργαστηριακό Τετράδιο (Laboratory Notebook, Lab-book)

Σημαντικότητα Εργαστηριακού Τετραδίου

Το εργαστηριακό τετράδιο θα πρέπει να αποτελεί την αμέσως επόμενη πιο σημαντική προτεραιότητα κάθε πειραματικού Χημικού, μετά από το ίδιο το πείραμα. Δεν πρόκειται απλά για ένα σημειωματάριο καταγραφής συνθηκών και δεδομένων, αλλά για το αλληλεπιδραστικό/ζωντανό μέσο αποτύπωσης κάθε ιδιαιτερότητας, παρατήρησης και συλλογισμού του αναλυτή, σε πραγματικό χρόνο εξέλιξης του πειράματος. Ο ρόλος και η χρησιμότητα του lab-book δεν περιορίζονται στην εντός εργαστηρίου χρήση του, την κατασκευή διαγραμμάτων από τα καταγεγραμμένα δεδομένα ή την απλή ανάκληση των πειραματικών συνθηκών στη μνήμη του αναλυτή. Ο πλούτος της πληροφορίας που περιέχει ένα οργανωμένο και λεπτομερειακά τηρηθέν lab-book δύναται να αξιοποιηθεί περαιτέρω στην ερμηνεία των παρατηρούμενων φαινομένων, την κατανόηση ενδεχόμενων απροσδόκητων συμπεριφορών, καθώς επίσης στην αντιμετώπιση προβλημάτων και τη στοχευμένη σχεδίαση πειραμάτων, για την εις βάθος και ακριβέστερη κατανόηση των προς μελέτη αντικειμένων. Συνεπώς, όπως γίνεται αντιληπτό, η ορθή τήρηση του lab-book είναι αναπόσπαστο και αδιαίρετο μέρος της ποιοτικής έρευνας και συνακόλουθα το ζητούμενο και ενδεχόμενα, ως ένα ορισμένο σημείο, το μέτρο για οποιονδήποτε **καλό** πειραματικό χημικό.

Δομή Εργαστηριακού Τετραδίου

Πριν το Εργαστήριο.

1. Τίτλος Πειράματος, Ημερομηνία, Εργαστηριακή Ομάδα

Παράδειγμα:

23 Σεπτεμβρίου 2015

Φασματοσκοπία Υπερύθρου

Ομάδα Δ1: Χριστόπουλος Μιχάλης (Α.Μ.: 1), Μαυροδήμου Ελένη (Α.Μ.: 2)
Κωνσταντίνου Νίκος (Α.Μ.: 3), Παπαδόπουλος Γιώργος (Α.Μ.: 4)

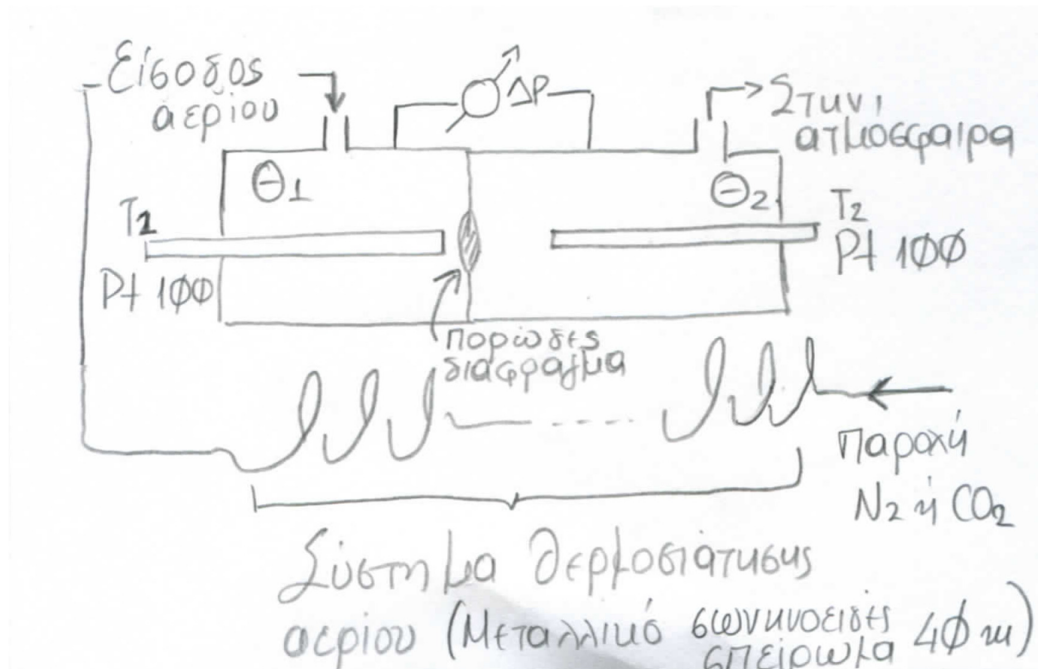
2. Αντικείμενο και Σκοπός Πειράματος

Σε έκταση 1-2 παραγράφων περιγράφεται συνοπτικά, αλλά με ακρίβεια, το αντικείμενο και ο σκοπός του πειράματος. Επίσης, αναφέρονται τα μεγέθη που θα

προσδιοριστούν, το εύρος των συνθηκών (π.χ. Πίεση και θερμοκρασία) και η μέθοδος/πειραματική διάταξη που θα χρησιμοποιηθεί.

3. Οργανολογία

Σχηματική Απεικόνιση Πειραματικής Διάταξης (block-diagram)



Ένα απλό περιγραμματικό σχέδιο των βασικών μερών από τα οποία απαρτίζεται η πειραματική διάταξη, με ένθετη αρίθμηση και χρήση κεφαλίδων για την περιγραφή τους, σημειώνοντας με ① το κεντρικό τμήμα της διάταξης, δηλαδή το χώρο που συμβαίνει το φαινόμενο που μελετάται, π.χ., αντιδραστήρας. Στη συνέχεια, περιγράφονται τα επιμέρους τμήματα, με λογική σειρά, βάσει της ροής του πειράματος, εξηγώντας το σκοπό που υπηρετούν.

Παράδειγμα:

① Θάλαμος αδιαβατικής εκτόνωσης αερίων, διαμεριζόμενος εσωτερικά, μέσω πορώδους διαφράγματος (ρόλο εμβόλου), σε δύο υποθαλάμους (Θ1 και Θ2). Ο θάλαμος είναι κατασκευασμένος από γυαλί, ώστε η παρατηρούμενη μεταβολή να συμβαίνει ισοενθαλπικά. Ο Θ2 εκτίθεται σε εργαστηριακή πίεση και θερμοκρασία, μέσω ανοικτής εξόδου και πρόκειται για το χώρο χαμηλής πίεσης, ενώ στον Θ1 ή χώρος υψηλής πίεσης εισάγεται ρυθμιζόμενη παροχή του εκάστοτε επιθυμητού αερίου (N_2 ή CO_2).

②

③

Σημείωση: Κατά την ώρα της εργαστηριακής άσκησης, οι εκπαιδευόμενοι φοιτητές θα πρέπει να διευκρινίσουν και να κατανοήσουν σε βάθος το ρόλο που υπηρετούν τα επιμέρους στοιχεία, από τα οποία απαρτίζεται η διάταξη και να βελτιστοποιήσουν την περιγραφή τους στην αναφορά που θα συγγραφεί μετά το πέρας του πειράματος. Ως εκ τούτου, είναι σημαντικό, τόσο να συζητηθεί με τους μεταπτυχιακούς, το εν λόγω σχήμα, όσο και να σημειώσουν εντός του εργαστηριακού τετραδίου, τα όποια κενά, ως προς τη μορφή ή την κατανόηση είχε η αρχική του έκδοση.

3. Πειραματική Διαδικασία

Στο τμήμα αυτό του εργαστηριακού οδηγού περιγράφεται με ακρίβεια και χωρίς πλατειασμούς η πειραματική διαδικασία που ακολουθείται. Επιπρόσθετα αυτού, εν τη ροή της περιγραφής, περιγράφονται επίσης τα μεγέθη που θα μετρηθούν, η φυσική τους σημασία και το όποιο θεωρητικό υπόβαθρο απαιτείται για την κατανόησή τους και τον προσδιορισμό τους.

Παράδειγμα: Στο πείραμα της Απορρόφησης υπεριώδους ορατού θα μετρηθεί η απορροφητικότητα A , για δεδομένες συγκεντρώσεις χρωστικών ουσιών. Το φυσικό φαινόμενο που περιγράφει τη διαδικασία είναι η απορρόφηση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, στο παρατηρούμενο εύρος μήκους κύματος, από τα προπαρασκευασμένα διαλύματα. Η ένταση της απορρόφησης (Απορροφητικότητα) περιγράφεται από το νόμο των Beer-Lambert:

$$A = \varepsilon(\lambda) \times l \times [M]$$

Όπου, A , η απορροφητικότητα και εκφράζεται μέσω του αρνητικού δεκαδικού λογαρίθμου της διαπερατότητας ($-\log(T)$, $T = I_0/I_f$ και I_0 , η ένταση της ακτινοβολίας που φτάνει στον ανιχνευτή απουσία της χρωστικής ουσίας και I_f , η ένταση που φτάνει στον ανιχνευτή για δεδομένη συγκέντρωση διαλύματος), $\varepsilon(\lambda)$, ο μοριακός συντελεστής απορροφητικότητας που αποτελεί το μέτρο ισχύος της αλληλεπίδρασης συγκεκριμένου μήκους κύματος, λ , της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με τη χρωστική και αποτελεί εγγενή ιδιότητα της ύλης ($M^{-1} \text{ cm}^{-1}$), l , η οπτική διαδρομή που αφορά στο μήκος που διανύει το φως αλληλεπιδρώντας με την εκάστοτε χρωστική (cm) και $[M]$, η συγκέντρωση της χρωστικής στο διάλυμα (M).

Δόμηση Περιεχομένων Πίνακα:

Στο τελευταίο στάδιο της συγκεκριμένης ενότητας, οι φοιτητές θα πρέπει να αναφέρουν τα μεγέθη που θα προσδιοριστούν και πως αυτά προκύπτουν από τις αρχικά μετρούμενες ποσότητες (συναρτήσεις-εξάρτηση), ώστε στο επόμενο στάδιο και εντός της εργαστηριακής ώρας να είναι προετοιμασμένοι, κατά το δυνατόν, για

την κατασκευή των πινάκων και ακολούθως των διαγραμμάτων. Μέσω της κατασκευής γραφημάτων κατά την εξέλιξη της εργαστηριακής άσκησης γίνεται εφικτός ο έλεγχος του πειράματος και των συνθηκών του σε πραγματικό χρόνο, καθώς επίσης και η αξιολόγηση των μετρούμενων τιμών των φυσικών ποσοτήτων, που αποτελούν το αντικείμενο της εκάστοτε εργαστηριακής άσκησης.

Στο Εργαστήριο.

4. Αποτελέσματα και Καταγραφή τους

a. *Καταγραφή εργαστηριακών παραμέτρων.* Αρχικά και ενίοτε κατά τη διάρκεια των εργαστηριακών ασκήσεων καταγράφονται οι συνθήκες που επικρατούν στο χώρο εργασίας (ambient conditions ή laboratory conditions), όπως η εργαστηριακή πίεση, P_{lab} και θερμοκρασία, T_{lab} , καθώς και επιπρόσθετες εργαστηριακές συνθήκες που απαιτούνται στην κάθε άσκηση, π.χ., επίπεδο υγρασίας. Πέρα από τις συνθήκες καθεαυτές, καταγράφεται και το όριο εμπιστοσύνης (αβεβαιότητα) των μετρούμενων ενδείξεων, π.χ. $P_{lab} = 1013 \pm 2$ mbar. Σε ορισμένες εργαστηριακές ασκήσεις απαιτείται η συνεχής παρακολούθηση και καταγραφή των εργαστηριακών συνθηκών, οπότε θα πρέπει να καταγράφονται και αυτές σε κάποια από τις στήλες του πίνακα. Αν δεν μεταβάλλονται σημαντικά ή το πείραμα δεν είναι ιδιαίτερα ευαίσθητο σε αυτές, δύναται η καταγραφή τους να γίνει στην αρχή, τη μέση και το τέλος του πειράματος, οπότε σε αυτή την περίπτωση δεν περιέχονται σε στήλες στον πίνακα.

b. *Καταγραφή εργαστηριακών παραμέτρων/συνθηκών.* Στην πλειονότητα των εργαστηριακών ασκήσεων, οι συνθήκες του πειράματος ρυθμίζονται και καθορίζονται από τον αναλυτή. Συνεπώς, θα πρέπει να περιέχονται είτε στο εργαστηριακό τετράδιο, **πάντα** με τις αβεβαιότητές τους, ως απλή αναφορά, αν είναι σταθερές είτε να καταγράφονται σε στήλες πίνακα, αν μεταβάλλονται κατά τη διάρκεια της πειραματικής διαδικασίας. Βοηθητικό στάδιο για την κατασκευή πινάκων αποτελεί το τελευταίο σημείο της πειραματικής διαδικασίας (*Δόμηση Περιεχομένων Πίνακα*), κατά την προετοιμασία του εργαστηριακού τετραδίου, πριν τη διεξαγωγή του πειράματος. Στους πίνακες, αναγράφονται ως κεφαλίδες κολώνων τα φυσικά μεγέθη που μετρούνται, οι αβεβαιότητές τους, καθώς και οι μονάδες τους. Λόγω περιορισμού χώρου, οι μονάδες των ποσοτήτων μπορούν να μπου σαν υποσημείωση στο τέλος του πίνακα με την κατάλληλη επισήμανση της παραπομπής εντός του κελιού του πίνακα που αναφέρονται.

c. *Υποσημειώσεις Πίνακα.* Κατά τη διεξαγωγή του πειράματος, συχνά, ορισμένες μετρήσεις εμφανίζουν ιδιαιτερότητες ή περίεργη συμπεριφορά, εξαιτίας απρόσμενων φαινομένων που αποκλίνουν από τον αρχικό σχεδιασμό του πειράματος. Για παράδειγμα, κατά τη μέτρηση της θερμοκρασίας σε μία μέτρηση, ενδέχεται να ακούμπησε κάποιος το θερμοζεύγος ή να έπεσε η τάση του ρεύματος και η ένδειξη που αναγνώστηκε να οδήγησε σε περίεργη τιμή της. Σε αυτές τις περιπτώσεις, αλλά και εν γένει, σε περιπτώσεις όπου ο αναλυτής παρατηρεί κάτι

ιδιαίτερο σε κάποια μέτρηση ή δοκιμάζει κάτι διαφορετικό, οφείλει να το επισημάνει εντός του πίνακα με κωδικοποιημένο σύμβολο ή αρίθμηση και να προσθέσει υποσημείωση κάτω από τον πίνακα.

d. *Γενικές Παρατηρήσεις / Σημειώσεις / Σχόλια*. Το τελευταίο και μείζονος σημασίας περιεχόμενο του εργαστηριακού τετραδίου είναι οι γενικές παρατηρήσεις, απορίες και σχόλια του ίδιου του αναλυτή, που προκύπτουν κατά τη διάρκεια της εργαστηριακής άσκησης. Η συγκεκριμένη ενότητα είναι εξαιρετικά σημαντική, καθώς θα αποτελέσει το σημείο αναφοράς και διασύνδεσης για τον αναλυτή με το ίδιο το πείραμα, κατά τη συγγραφή της τελικής αναφοράς. Επίσης, θα βοηθήσουν τον αναλυτή να κατανοήσει και να ερμηνεύσει φαινόμενα που παρατηρούνται στο συγκεκριμένο πείραμα, τα οποία θα πρέπει να παρουσιαστούν στην εργαστηριακή αναφορά. Επισημαίνεται ότι το κάθε πείραμα είναι μοναδικό και συνεπώς οι παρατηρήσεις/σχόλια/συμπεράσματα του κάθε αναλυτή είναι επίσης μοναδικά και δεν είναι δυνατόν να προκύψουν κατόπιν της διεξαγωγής του πειράματος, παρά μόνο αν έχουν γίνει οι κατάλληλες επισημάνσεις.

OriginLab Γνωστικό Αντικείμενο

1. Δημιουργία κολόνων X-Y από πειραματικά δεδομένα

- i. Ονομασία κολόνων / Οργάνωση
- ii. Ορισμός κολόνων ως X, Y και Z και ορισμός κολόνων ως σφάλματα σε κάθε κολόνα.

2. Δημιουργία Γραφικής Παράστασης

- i. Είδη γραφικής αναπαράστασης όπως: Γραφική απεικόνιση σημείων (scatter plot), σημειακή αναπαράσταση με γραμμές που ενώνουν τα σημεία κατά αύξοντα αριθμό (line + symbol), ραβδόγραμμα (columns/Bars)
- ii. Συμπερίληψη ορίων σφάλματος

3. Αριθμητική Προσαρμογή Πειραματικών Σημείων με συγκεκριμένη/κατάλληλη συνάρτηση και ανάλυση και φυσική σημασία των παραμέτρων και των σφαλμάτων που παράγονται κατά την προσαρμογή

- i. Γραμμική προσαρμογή σημείων (Linear Fit, $Y = aX + b$, $SE_{\bar{x}} = \frac{s}{\sqrt{n}}$, $s = \sqrt{\frac{1}{n-1} [\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2]}$)

- ii. Η προσαρμογή των σημείων αποσκοπεί να παράγει τη βέλτιστη θεωρητική συνάρτηση που περιγράφει τα πειραματικά σημεία, $\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - f(x_i)}{\sigma_i} \right)^2$, $reduced \chi^2 = \frac{\chi^2}{n-p}$

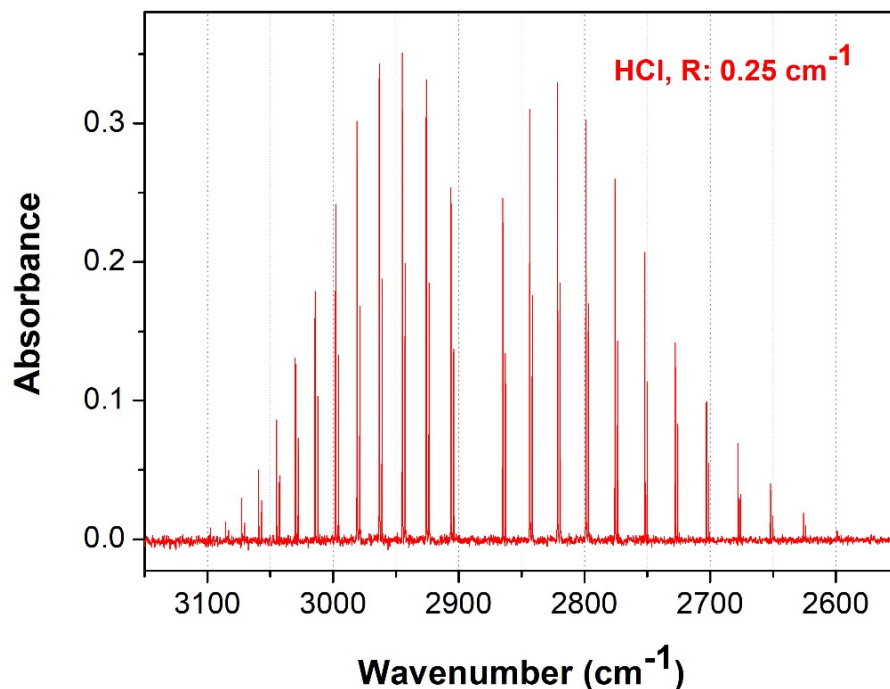
Σημείωση: Στην επεξεργασία των πειραματικών δεδομένων που παράγονται στο εργαστήριο ΦΧΙ, όταν συμπεριλαμβάνουμε τα σφάλματά μας ως συντελεστή βαρύτητας ΔΕΝ χρειάζεται να χρησιμοποιούμε τη μέθοδο reduced χ^2 . Linear Fit \rightarrow error as weight: Instrumental ($w_i=1/\sigma_i^2$) \rightarrow απενεργοποίηση του reduced chi-sqr

- iii. Διαθέσιμες μη γραμμικές συναρτήσεις (Non Linear Curve Fit)
- iv. Δημιουργία συνάρτησης από το χρήστη (Non Linear Curve Fit \rightarrow New)

Σημείωση: Ο ορισμός αρχικών τιμών κρίσιμος ειδικά όταν οι βαθμοί ελευθερίας της συνάρτησης ($n-p$) μειώνονται, n : αριθμός σημείων, p : παράμετροι συνάρτησης

4. Μορφοποίηση γραφικής παράστασης

- i. Συμπερίληψη άνω και δεξιού αξόνων στη γραφική παράσταση χωρίς ticks εκτός αν έχουν φυσική σημασία.
- ii. Τα ticks στους κάτω και αριστερό άξονες εκτός πλαισίου διαγράμματος (outside)
- iii. Ευανάγνωστοι τίτλοι αξόνων με επαρκές μέγεθος γραμματοσειράς, π.χ., Times New Roman, 28.
- iv. Μορφοποίηση τίτλου άξονα: Παράμετρος (<εκθετικό μέρος> μονάδες), π.χ.: [HCl] (10^{16} molecule cm^{-3})
- v. Αλλαγή αξόνων από γραμμικούς σε λογαριθμικούς αν χρειάζεται



5. Εισαγωγή δεδομένων από αρχείο κειμένου κατάλληλα μορφοποιημένου (Import Single ASCII).
Χρήσιμο σε περιπτώσεις λήψης φασμάτων ή μεγάλου όγκου δεδομένων που λαμβάνονται μέσω μια κάρτας πρόσκτησης δεδομένων και αποθηκεύονται σε αντίστοιχα ASCII αρχεία.

Σημεία προσοχής:

- i. Ποιος χαρακτήρας χρησιμοποιείται για τη διάκριση των κολόνων, π.χ., space, tab, comma
- ii. Συμβατότητα χαρακτήρα που χρησιμοποιείται ως υποδιαστολή με το Origin, π.χ., comma ή dot (, ή .)

6. Εργασία σε διαφορετικά layers (Εισαγωγή σφαλμάτων κατόπιν κατασκευής διαγράμματος, αλλαγή ανεξάρτητης και εξαρτημένης μεταβλητής, συμπερίληψη περαιτέρω διαγραμμάτων στη γραφική παράσταση από άλλες κολόνες για σύγκριση)

7. Προηγμένες ενέργειες χρηστών, όπως διαίρεση αξόνων για την καλύτερη απεικόνιση τμήματος φάσματος, χρωματικός κώδικας κ.α..

8. Residual Plot.

Το υπολειμματικό διάγραμμα, επί τοις %, περιγράφει την απόκλιση κάθε σημείου, ήτοι της κάθε πειραματικής μέτρησης, από τη βέλτιστη συνάρτηση προσαρμογής (Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων) του συνόλου των πειραματικών δεδομένων.

$$\mathbf{f(x) = a_f + b_f x}$$

Αντίστοιχα, για κάθε σημείο $i(x_i, y_i)$ θα ισχύει:

$$\mathbf{f(x_i) = a_i + b_i x}$$

Δεδομένου ότι από ένα σημείο διέρχονται άπειρες ευθείες και δεν είναι δυνατός ο ορισμός της τεταγμένης επί τον Y, στην πλειονότητα των περιπτώσεων που η τιμή της ιδιότητας με φυσική σημασία σχετίζεται με την κλίση της καμπύλης, το a_i ταυτίζεται με το a_f και το b_i προσδιορίζεται μέσω της έκφρασης:

$$b_i = \frac{(f(x_i) - a_f)}{x_i}$$

Στην περίπτωση αυτή, η απόκλιση που εμφανίζεται μεταξύ του μετρούμενου πειραματικού σημείου και της καμπύλης της συνάρτησης βέλτιστης προσαρμογής περιγράφεται από την έκφραση:

$$\frac{b_i - b_f}{|b_i|} \times 100 \%$$

Σημεία Προσοχής:

1. Το διάγραμμα προσδιορισμού της τιμής της φυσικής ιδιότητας και το υπολειμματικό διάγραμμα πρέπει να είναι σε στοίχιση και ενοποιημένα.
2. Ο άξονας της ανεξάρτητης μεταβλητής και στα δύο διαγράμματα πρέπει να έχει το ίδιο εύρος τιμών (min, max) και να φαίνεται πάντα το ελάχιστο του πεδίου τιμών στο οποίο ορίζεται.

3. Όταν η συνάρτηση αναπαριστά τη συμπεριφορά των πειραματικών σημείων, τότε στο υπολειμματικό διάγραμμα η απόκλιση εμφανίζεται σαν διασπορά περί της μηδενικής απόκλισης και δεν εμφανίζεται καμία συστηματική τάση.

4. Η όποια συστηματικότητα στο residual plot δηλώνει ότι η συνάρτηση δεν αναπαράγει τα πειραματικά δεδομένα και δεν έχει ουδεμία σχέση με συστηματικά σφάλματα των μετρήσεων.

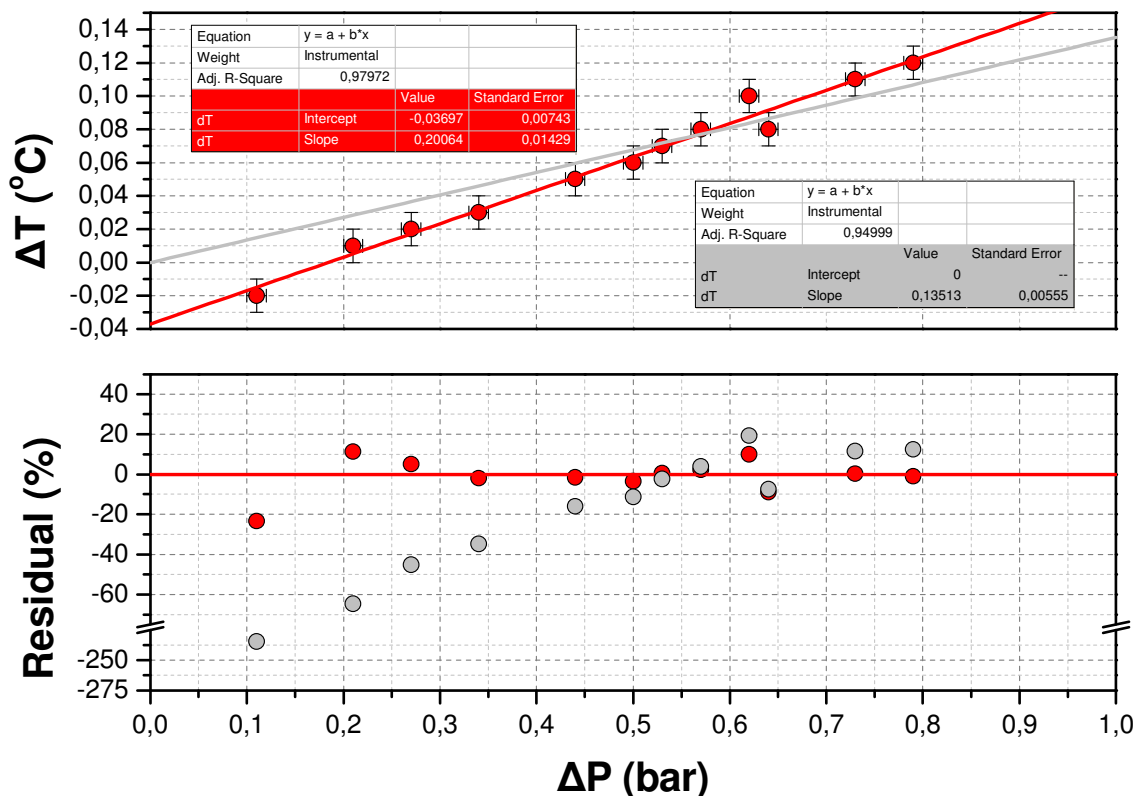


Table1. Summary of experimental conditions and rate coefficients, $k_1(T, M)$, determined for the Cl + CF₃CF=CH₂ reaction. (Πίνακας από δημοσιευμένη εργασία)

| T (K) | Number Density (10 ¹⁸ cm ⁻³) | Bath Gas (Torr of O ₂) | [Cl ₂] ₀ (10 ¹⁶ cm ⁻³) | [CF ₃ CF=CH ₂] ₀ (10 ¹⁶ cm ⁻³) | [CH ₃ CH ₃] ₀ (10 ¹⁶ cm ⁻³) | $k(T, M)^a$ (10 ⁻¹¹ cm ³ molecule ⁻¹ s ⁻¹) |
|-------|---|-------------------------------------|--|---|--|---|
| 220 | 27.7 | ZA | 1.38 | 0.97 | 1.94 | 8.96 ± 0.06 |
| 247 | 1.95 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.24 | 4.54 | 8.75 | 7.52 ± 0.09 |
| 247 | 3.91 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.24 | 4.86 | 7.78 | 7.89 ± 0.07 |
| 247 | 7.82 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.24 | 4.54 | 7.13 | 7.98 ± 0.09 |
| 247 | 15.6 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.24 | 4.86 | 8.10 | 8.07 ± 0.07 |
| 247 | 24.6 | ZA | 1.30 | 1.07 | 1.94 | 8.27 ± 0.09 |
| 247 | 24.6 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.24 | 4.54 | 7.45 | 8.20 ± 0.26 |
| | | | | | | $k(247\text{ K}, 24.6 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}) = 8.22 \pm 0.08^c$ |
| 273 | 1.77 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.24 | 4.86 | 6.48 | 6.76 ± 0.06 |
| 273 | 3.54 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.24 | 4.54 | 7.45 | 6.95 ± 0.08 |
| 273 | 7.07 | N ₂ -O ₂ (20) | 4.05 | 6.16 | 7.45 | 7.44 ± 0.07 |
| 273 | 14.1 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.24 | 5.51 | 6.80 | 7.54 ± 0.13 |
| 273 | 22.3 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.24 | 5.18 | 6.48 | 7.67 ± 0.10 |
| 296 | 0.86 | N ₂ -O ₂ (10) | 2.43 | 3.89 | 4.21 | 5.04 ± 0.02 |
| 296 | 1.63 | N ₂ -O ₂ (10) | 2.43 | 3.89 | 4.21 | 5.64 ± 0.07 |
| 296 | 1.63 | N ₂ -O ₂ (20) | 2.43 | 3.89 | 4.21 | 5.74 ± 0.04 |

| | | | | | | |
|-----|------|--------------------------------------|------|------|-------------------|---|
| | | | | | | $k(296 \text{ K}, 1.63 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}) = 5.70 \pm 0.04^c$ |
| 296 | 3.26 | N ₂ -O ₂ (20) | 2.43 | 3.89 | 4.21 | 6.54 ± 0.06 |
| 296 | 3.26 | N ₂ -O ₂ (80) | 2.43 | 4.21 | 4.54 | 6.47 ± 0.08 |
| | | | | | | $k(296 \text{ K}, 3.26 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}) = 6.53 \pm 0.05^c$ |
| 296 | 6.52 | N ₂ -O ₂ (20) | 2.43 | 3.89 | 4.21 | 7.04 ± 0.05 |
| 296 | 20.6 | N ₂ | 2.43 | 2.59 | 3.24 | 7.19 ± 0.10 |
| 296 | 20.6 | N ₂ | 3.24 | 1.30 | 1.30 | 7.31 ± 0.08 |
| 296 | 20.6 | ZA | 1.94 | 2.07 | 3.56 | 7.23 ± 0.04 |
| 296 | 20.6 | N ₂ -O ₂ (580) | 4.05 | 3.24 | 4.86 | 7.38 ± 0.11 |
| 296 | 20.6 | N ₂ -O ₂ (10) | 2.43 | 3.89 | 4.21 | 7.36 ± 0.08 |
| 296 | 20.6 | O ₂ | 3.24 | 3.24 | 5.18 | 7.50 ± 0.09 |
| 296 | 20.6 | ZA | 11.3 | 6.48 | 16.2 ^b | 7.31 ± 0.30 |
| 296 | 20.6 | ZA | 11.3 | 16.2 | 35.6 ^b | 7.41 ± 0.15 |
| 296 | 20.6 | N ₂ | 17.8 | 16.2 | 32.4 ^b | 7.70 ± 0.16 |
| 296 | 20.6 | N ₂ | 27.5 | 32.4 | 32.4 ^b | 7.70 ± 0.10 |
| | | | | | | $k(296 \text{ K}, 20.6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}) = 7.48 \pm 0.08^c$ |
| 338 | 1.43 | N ₂ -O ₂ (20) | 2.43 | 4.21 | 7.13 | 4.18 ± 0.05 |
| 338 | 2.86 | N ₂ -O ₂ (20) | 2.75 | 4.21 | 4.54 | 4.79 ± 0.06 |
| 338 | 5.71 | N ₂ -O ₂ (20) | 2.43 | 4.21 | 4.54 | 5.53 ± 0.04 |
| 338 | 11.4 | N ₂ -O ₂ (20) | 2.92 | 4.21 | 4.54 | 6.24 ± 0.06 |
| 338 | 18.0 | N ₂ -O ₂ (20) | 4.05 | 4.21 | 4.54 | 6.69 ± 0.07 |
| 380 | 1.31 | N ₂ -O ₂ (20) | 2.92 | 5.83 | 6.16 | 2.84 ± 0.07 |
| 380 | 1.31 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.08 | 4.86 | 6.16 | 2.81 ± 0.02 |
| 380 | 1.31 | N ₂ -O ₂ (10) | 3.08 | 6.16 | 6.48 | 2.85 ± 0.01 |
| | | | | | | $k(380 \text{ K}, 1.31 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}) = 2.81 \pm 0.02^c$ |
| 380 | 2.54 | ZA | 3.24 | 3.24 | 4.86 | 3.29 ± 0.05 |
| 380 | 2.54 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.08 | 4.86 | 6.16 | 3.51 ± 0.02 |
| | | | | | | $k(380 \text{ K}, 2.54 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}) = 3.42 \pm 0.04^c$ |
| 380 | 5.08 | ZA | 3.24 | 3.24 | 4.86 | 4.02 ± 0.02 |
| 380 | 10.2 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.08 | 6.16 | 7.13 | 4.99 ± 0.03 |
| 380 | 10.2 | ZA | 3.24 | 3.24 | 5.51 | 4.96 ± 0.04 |
| | | | | | | $k(380 \text{ K}, 10.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}) = 4.97 \pm 0.03^c$ |
| 380 | 16.0 | ZA | 4.05 | 3.24 | 6.48 | 5.44 ± 0.03 |
| 380 | 16.0 | N ₂ -O ₂ (20) | 3.08 | 5.51 | 6.48 | 5.45 ± 0.05 |
| | | | | | | $k(380 \text{ K}, 16.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}) = 5.45 \pm 0.03^c$ |

^a Error limits are the 2σ precision of the linear least-squares fit of the experimental data to eqn. I.,
^b CH₂=CH₂ concentration and Cl + CH₂=CH₂ used for the reference reaction. ^c The rate coefficient was obtained from a linear least-squares fit of all data obtained at the given temperature and pressure to eqn. I. ZA: Zero air.

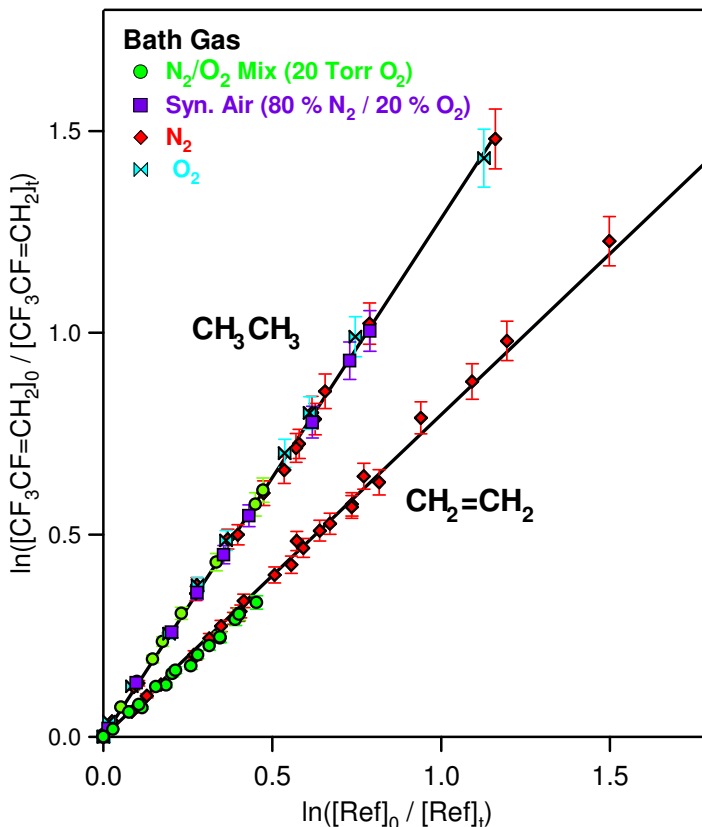


Figure 2. Relative rate data obtained at room temperature, 296 K, and 630 Torr for the reaction of Cl with $\text{CF}_3\text{CF}=\text{CH}_2$ using $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ and CH_3CH_3 reference compounds. The symbols indicate measurements made with different bath gas composition as indicated in the legend. The lines are linear least-squares fits of the data to eqn. 1 that yield rate coefficients for reaction 1. The error bars are from the precision of the measurement. (Διάγραμμα από δημοσιευμένη εργασία)

Οδηγίες Μη Γραμμικής Προσαρμογής Πειραματικών Αποτελεσμάτων

Οι συγκεκριμένη μεθοδολογία χρησιμοποιείται στα πειράματα α. Malus β. Κατανομή Ταχυτήτων Maxwell Boltzmann και οι οδηγίες αφορούν στο λογισμικό Origin 8. Για τις νεότερες εκδόσεις του Origin η μεθοδολογία είναι αντίστοιχη, με ορισμένες διαφορές στα menu των αναβαθμισμένων εκδόσεων.

Εισαγωγή

Πολλές φορές ο νόμος που εκφράζει τα πειραματικά αποτελέσματα δεν υπάρχει στις βασικές εξισώσεις του Origin ή η εξίσωση δεν είναι προσαρμοσμένη σε συγκεκριμένες απαιτήσεις κάποιου πειράματος. Στην περίπτωση αυτή, δομείται η συνάρτηση που περιγράφει το φυσικό φαινόμενο

και με διαδοχικούς κύκλους προσδιορισμού των βέλτιστων τιμών των παραμέτρων της συνάρτησης (iterations) προσαρμόζονται τα πειραματικά δεδομένων. Η μέθοδος στηρίζεται στην ελαχιστοποίηση των αθροισμάτων των τετραγώνων της διασποράς των πειραματικών σημείων επί της θεωρητικής καμπύλης. Η βέλτιστη προσαρμογή επιτυγχάνεται όταν οι παράμετροι συγκλίνουν, ώστε να ελαχιστοποιηθεί το εν λόγω άθροισμα.

A. Malus: Πείραμα φωτεινής πηγής Laser διόδου ($\lambda = 650 \text{ nm}$) με ένα πολωτή.

Βήμα 1. Μετά την αποτύπωση των πειραματικών δεδομένων των στηλών σε διάγραμμα ακολουθείται η κάτωθι διαδικασία:

Analysis \rightarrow Non linear curve fitting \rightarrow Open dialogue

Βήμα 2. Category New \rightarrow Ονομασία Κατηγορίας Συνάρτησης, π. χ., Malus

Βήμα 3. New function: Ονομασία Συγκεκριμένης Συνάρτησης π. χ., Malus_1pol



Βήμα 4. Εισαγωγή Συνάρτησης: $p1 * (\cos((2 * x) - a)) + P2$

Βήμα 5. Στο πεδίο Function form επιλέγεται: Expression

Βήμα 6. Ορισμός παραμέτρων βελτιστοποίησης: p1, a, P2

Βήμα 7. Αποθήκευση: save

Βήμα 8. Ορισμός αρχικών τιμών των παραμέτρων στον πίνακα που ανοίγει (Value).

Βήμα 9. Εκκίνηση διαδοχικών iterations μέσω επιλογής του εικονιδίου . Η εντολή εκτελείται σταδιακά εκκινώντας έναν κύκλο κάθε φορά που επιλέγεται το εικονίδιο. Εναλλακτικά μέσω επιλογής του εικονιδίου  εκτελούνται όλοι οι κύκλοι της βελτιστοποίησης της προσαρμογής, μέχρι ορίου Σύγκλισης.

Βήμα 10. Η βέλτιστη προσαρμογή των σημείων εμπεριέχεται στο διάγραμμα με συνεχή γραμμή. Η βέλτιστες τιμές των παραμέτρων προκύπτουν όταν το άθροισμα των ελαχίστων τετραγώνων συγκλίνει στην ελάχιστη τιμή και οι ζητούμενες τιμές αναφέρονται στο πινακάκι εντός του διαγράμματος, μαζί με το όριο εμπιστοσύνης (τυχαίο σφάλμα: Επαναληψιμότητα) σε επίπεδο 1σ , καθώς επίσης, χρήσιμα στατιστικά στοιχεία της προσαρμογής.

B. Malus: Πείραμα φωτεινής πηγής Laser διόδου ($\lambda = 650 \text{ nm}$), με δυο πολωτές και πλακίδιο καθυστέρησης $\lambda/4$.

Τα βήματα που διαφοροποιούνται σε σχέση με την άνωθι διαδικασία αναφέρονται ακολούθως:



Βήμα 3. New function: Ονομασία Συγκεκριμένης Συνάρτησης π. χ., Malus_2pol

Βήμα 4. Εισαγωγή Συνάρτησης: $P1*(\sin(x+a))^2*(\cos(x+a))^2$

Βήμα 6. Ορισμός παραμέτρων βελτιστοποίησης: P1, a

Βήμα 7. Αποθήκευση: save

Βήμα 8. Ορισμός αρχικών τιμών των παραμέτρων στον πίνακα που ανοίγει (Value).

Βήμα 9. Εκκίνηση διαδοχικών iterations μέσω επιλογής του εικονιδίου . Η εντολή εκτελείται σταδιακά εκκινώντας έναν κύκλο κάθε φορά που επιλέγεται το εικονίδιο. Εναλλακτικά μέσω επιλογής του εικονιδίου  εκτελούνται όλοι οι κύκλοι της βελτιστοποίησης της προσαρμογής, μέχρι ορίου Σύγκλισης.

Βήμα 10. Η βέλτιστη προσαρμογή των σημείων εμπεριέχεται στο διάγραμμα με συνεχή γραμμή. Η βέλτιστες τιμές των παραμέτρων προκύπτουν όταν το άθροισμα των ελαχίστων τετραγώνων συγκλίνει στην ελάχιστη τιμή και οι ζητούμενες τιμές αναφέρονται στο πινακάκι εντός του διαγράμματος, μαζί με το όριο εμπιστοσύνης (τυχαίο σφάλμα: Επαναληψιμότητα) σε επίπεδο 1σ, καθώς επίσης, χρήσιμα στατιστικά στοιχεία της προσαρμογής.

3. Κατανομή ταχυτήτων Maxwell-Boltzmann

Βήμα 1. Μετά την αποτύπωση των πειραματικών δεδομένων των στηλών σε διάγραμμα ακολουθεί η κάτωθι διαδικασία:

Analysis → Non linear curve fitting → Open dialogue

Βήμα 2. Category New → Ονομασία Κατηγορίας: Maxwell

Βήμα 3. New function: Ονομασία Συγκεκριμένης Συνάρτησης π. χ., Maxwell_1

Βήμα 4. Εισαγωγή Συνάρτησης: $4*\rho_i*\text{norm}*((7,647e-4/A)^{1,5})*(x^2)*\exp((-2,4024e-3/A)*(x^2))$

$$\text{Όπου } \Phi_1(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right)$$

$M_{Ar} = 6.63368 \times 10^{-26}$ kg, μάζα ενός μορίου αργού.



Σταθερά Boltzmann: $k_B = 1.3806488(13) \times 10^{-23}$ J K⁻¹

Βήμα 5. Στο πεδίο Function form επιλέγεται: Expression

Βήμα 6. Ορισμός παραμέτρων βελτιστοποίησης: A, norm

Βήμα 7. Αποθήκευση: save

Βήμα 8. Ορισμός αρχικών τιμών των παραμέτρων στον πίνακα που ανοίγει (Value).

Βήμα 9. Εκκίνηση διαδοχικών iterations μέσω επιλογής του εικονιδίου . Η εντολή εκτελείται σταδιακά εκκινώντας έναν κύκλο κάθε φορά που επιλέγεται το εικονίδιο. Εναλλακτικά μέσω επιλογής του εικονιδίου  εκτελούνται όλοι οι κύκλοι της βελτιστοποίησης της προσαρμογής, μέχρι ορίου Σύγκλισης.

Βήμα 10. Η βέλτιστη προσαρμογή των σημείων εμπεριέχεται στο διάγραμμα με συνεχή γραμμή. Η βέλτιστες τιμές των παραμέτρων προκύπτουν όταν το άθροισμα των ελαχίστων τετραγώνων συγκλίνει στην ελάχιστη τιμή και οι ζητούμενες τιμές αναφέρονται στο πινακάκι εντός του διαγράμματος, μαζί με το όριο εμπιστοσύνης (τυχαίο σφάλμα: Επαναληψιμότητα) σε επίπεδο 1σ , καθώς επίσης, χρήσιμα στατιστικά στοιχεία της προσαρμογής.

Άσκηση Α01: Τάση Ατμών

Α01.I Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Κατασκευή διαγραμμάτων φυσικού λογαρίθμου της πίεσης, $\ln(P)$, συναρτήσει της αντίστροφης θερμοκρασίας, $1/T$, εφόσον αρχικά αφαιρεθεί το συστηματικό σφάλμα του μανομέτρου. Στα διαγράμματα πρέπει να συμπεριλαμβάνονται συγκριτικά τα δεδομένα κατά τη θέρμανση και την ψύξη του καθαρού ύδατος, κάθε κύκλου μετρήσεων, όπως επίσης οι προσαρμογές των πειραματικών σημείων και να παρατίθενται τα υπολειμματικά διαγράμματα (Residual Plots).

Επισημάνσεις: i. Απεικόνιση των σφαλμάτων, σε κάθε σημείο της γραφικής παράστασης (*απαιτείται διάδοση σφαλμάτων*) και ii. Η προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων θα γίνει βάσει της έκφρασης $\ln(P) = B \frac{1}{T} + C$, όπως προκύπτει από την έκφραση των Clausius – Clapeyron.

Ζητούμενα:

A. Προσδιορισμός της ενθαλπίας εξάτμισης, ΔH_{vap} (cal mol^{-1}), χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα των προσαρμογών των διαγραμμάτων και την έκφραση 5. Η τιμή του παράγοντα συμπιεστότητας, z , προκύπτει από την έκφραση, μέσω της οποίας κατασκευάστηκε το διάγραμμα του σχήματος Α1.2.2.1. Συγκρίνετε και σχολιάστε τα αντίστοιχα αποτελέσματά σας θεωρώντας ιδανική συμπεριφορά για τους υδρατμούς ($z = 1$).

B. Σχολιασμός της τάσης που παρατηρείται σχετικά με τη διασφάλιση συνθηκών ισορροπίας, κατά τη μέτρηση της τάσης ατμών α. κατά τη θέρμανση και β. κατά την ψύξη του καθαρού ύδατος. Αιτιολογήστε τις παρατηρούμενες αποκλίσεις και αποτιμήσατε

Γ. Μέσω προσδιορισμού του σημείου ζέσεως του ύδατος, από τις πειραματικές μετρήσεις των τεσσάρων κύκλων (δύο ζεύγη μετρήσεων), και σύγκρισής του με τη βιβλιογραφική τιμή, α. αξιολογήστε ποσοτικά (επί τοις % απόκλιση) την επίδραση ενδεχόμενων αποκλίσεων από τη θερμοδυναμική ισορροπία, στις μετρήσεις σας και β. διερευνήστε αν η αναμενόμενη τιμή εμπεριέχεται στα όρια εμπιστοσύνης των μετρήσεών σας.

2. Συζητήστε τα πειραματικά σφάλματα του πειράματός σας και το πώς επιδρούν στα αποτελέσματά σας.

Επισημάνσεις: Προτείνετε βελτιώσεις της πειραματικής διάταξης και πειράματα ελέγχου που κάνατε (κατασκευή διαγράμματος) ή θα μπορούσατε να κάνετε για τον έλεγχο αξιοπιστίας των αποτελεσμάτων σας.

Α01.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Ποια είναι η μεταβολή της εντροπίας για την εξάτμιση του ύδατος στο κανονικό σημείο ζέσης; Ισχύει ο κανόνας του Trouton; Αιτιολογήστε.

2. Πόσοι βαθμοί ελευθερίας χρειάζονται για τον προσδιορισμό ενός συστατικού σε δύο φάσεις, βάσει του νόμου των φάσεων του Gibbs;

3. Εξηγήστε βάσει των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων, πώς εξαρτάται η εξάτμιση, το σημείο ζέσης και η τάση ατμών, από τη θερμοκρασία.

Άσκηση A02: Joule - Thomson

A02.I Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Κατασκευή διαγραμμάτων μεταβολής της θερμοκρασίας, ΔT , συναρτήσεως της μεταβολής της πίεσης, ΔP , και των υπολειμματικών διαγραμμάτων τους (Residual Plots), για τα αέρια που μελετήθηκαν στο πείραμα. Προσαρμογή των πειραματικών σημείων με την βέλτιστη συνάρτηση και κατασκευή συγκριτικού διαγράμματος για τα δυο αέρια, συμπεριλαμβάνοντας τα Residual Plots σε ένα διάγραμμα (2 panels).

Επισημάνσεις: i. Τα διαγράμματα συνίστανται από δύο panels (πάνω – κάτω): α. Πειραματικά δεδομένα και προσαρμογή τους και β. Residual Plot. Τα σφάλματα κάθε πειραματικής μέτρησης πρέπει να απεικονίζονται στο άνω γράφημα (panel α) της γραφικής παράστασης. ii. Εστιάστε στη γραμμικότητα της τάσης των πειραματικών τιμών και της τεταγμένης επί την αρχή (intercept).

Ζητούμενα:

A. Προσδιορισμός των συντελεστών Joule-Thomson, μ_{J-T} , για τα δύο αέρια του πειράματος και σχολιασμός της φυσικής σημασίας της διαφοράς τους.

B. Ποσοστιαία σύγκριση των πειραματικών αποτελεσμάτων για τα δύο αέρια (%) με τις θεωρητικές τιμές που προκύπτουν από τα μοντέλα των van der Waals, Beattie-Bridgeman, από τα δεδομένα που περιλαμβάνονται στον πίνακα 1, της Redlich-Kwong (RK): $\mu_{JT}^{RK} = \frac{1}{c_p} \left(\frac{5a}{2RT^2} - b \right)$ ($a(N_2) = 15.38 \text{ atm K}^{1/2} \text{ cm}^6 \text{ g}^{-2} \text{ mol}^{-2}$, $b(N_2) = 0.02677 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ και $a(CO_2) = 63.78 \text{ atm K}^{1/2} \text{ cm}^6 \text{ g}^{-2} \text{ mol}^{-2}$, $b(CO_2) = 0.02969 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ mol}^{-1}$) και τις αντίστοιχες της βιβλιογραφίας [4, εγχειρίδιο]. Κατασκευάστε πίνακα, όπου να απεικονίζεται η ποσοστιαία απόκλιση πειραματικών και θεωρητικών τιμών και σχολιάστε τη συμφωνία των μετρήσεών σας συνεκτιμώντας τα πειραματικά σφάλματα αυτών. Εξηγήστε τη φυσική σημασία των αποκλίσεων.

Δίνονται: $c_p(N_2) = 0.286 \text{ lt atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ και $c_p(CO_2) = 0.362 \text{ lt atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Πίνακας 1. Σταθερές για τον υπολογισμό του συντελεστή Joule – Thomson βάσει των θεωρητικών μοντέλων van der Waals και Beattie-Bridgeman. Για τους υπολογισμούς, οι μονάδες που θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν είναι: V σε lt, P σε atm, T σε K και $R = 0.08206 \text{ lt atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

| | van der Waals | | Beattie-Bridgeman | | | | |
|-----------------------|----------------|----------------|-------------------------------|------------------|-------------------------------|------------------|-------------------------------------|
| | ¹ a | ² b | ^{3,a} A ₀ | ^{3,b} a | ^{3,c} B ₀ | ^{3,d} b | ^{3,e} c (10 ⁴) |
| N₂ | 1.39 | 0.0391 | 1.3445 | 0.02617 | 0.05046 | -0.00691 | 4.20 |
| CO₂ | 3.59 | 0.0427 | 5.0065 | 0.07132 | 0.10476 | 0.07235 | 66.00 |

¹ atm lt²; ² lt; ³ Οι τιμές των σταθερών έχουν αναχθεί από το σύστημα SI, προκειμένου να απλοποιηθούν οι πράξεις των υπολογισμών. Ακολουθως, φαίνονται οι μονάδες στο σύστημα SI: ^a m³ kg⁻¹; ^b Nt m⁴ kg⁻²; ^c m³ kg⁻¹; ^d m³ kg⁻¹; ^e m³ K³ kg⁻¹

A02.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

- Εξηγήστε τη σημασία της απόκλισης των πραγματικών αερίων από την ιδανική συμπεριφορά και τη συσχέτισή της με τη συμπύκνωσή τους;
- Ποια είναι η φυσική σημασία της πτώσης της θερμοκρασίας, κατά την αδιαβατική εκτόνωση ενός πραγματικού αερίου.
- Υπολογίστε το συντελεστή μ_{JT} για τα αέρια που χρησιμοποιήσατε στο πείραμά σας, CO₂ και N₂, και την αντίστοιχη θερμοκρασία, βάσει του μοντέλου της Virial, εφόσον προσδιορίσετε το δεύτερο συντελεστή Virial προσαρμόζοντας τα δεδομένα του πίνακα 2, με δευτεροβάθμια συνάρτηση.

Πίνακας 2. Θερμοκρασιακή εξάρτηση του δεύτερου συντελεστή Virial, B_2 . Η θερμοκρασιακή συμπεριφορά του B_2 περιγράφεται ικανοποιητικά μέσω προσαρμογής των δεδομένων από δευτεροβάθμια συνάρτηση.

| N₂ | | CO₂ | |
|----------------------|---|-----------------------|---|
| T (K) | B₂(T) (cm³ mol⁻¹) | T (K) | B₂(T) (cm³ mol⁻¹) |
| 200 | -34 | 280 | -143 |
| 223.2 | -26.4 | 290 | -132.5 |
| 225 | -24 | 298.15 | -124.5 |
| 250 | -15 | 300 | -122.7 |
| 273.15 | -10.4 | 310 | -113.9 |
| 300 | -4 | 320 | -105.8 |
| 323.2 | -0.4 | | |

Άσκηση Α03: Γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα Αερίων

Α03.Ι Κατευθύνσεις –Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Κατασκευή διαγράμματος μεταβολής πίεσης, ως προς τον χρόνο θέρμανσης, $\Delta p/\Delta t$ (όπου Δp σε mbar και Δt σε sec) και προσαρμογή των πειραματικών σημείων με τη βέλτιστη συνάρτηση (γραμμική προσαρμογή). Διερεύνηση της φυσικής σημασίας της τεταγμένης επί την αρχή στον άξονα των y (intercept) και εξέταση εάν η προσαρμογή των τιμών μπορεί να πραγματοποιηθεί μηδενίζοντας το intercept. Αποτύπωση επίσης του διαγράμματος των σχετικών επί τοις εκατό καταλοίπων, κάθε τιμής σε σχέση με την συνάρτηση προσαρμογής (Residual Plot).

$$R(\%) = 100 \times \frac{b_i - b_f}{|b_i|}, b_i = \frac{y_i - \text{intercept}}{x_i}$$

Αποτύπωση των σφαλμάτων κάθε πειραματικού σημείου. Τα διαγράμματα και το αντίστοιχο Residual Plot πρέπει να συμπεριληφθούν σε ενιαίο διάγραμμα (2 panels), με κοινά όρια στην ανεξάρτητη μεταβλητή (t sec).

Ζητούμενο Α: Η γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα του αερίου \bar{C}_V προσδιορίζεται από την έκφραση Α3.27 του εγχειριδίου:

$$\bar{C}_V = \frac{R(UI\Delta t - aP\Delta P)}{(aP + V)\Delta P} = \frac{RUI\Delta t}{(aP + V)\Delta P} - \frac{aPR}{(aP + V)}$$

όπου R , η σταθερά των αερίων σε $\text{Joule K}^{-1} \text{mol}^{-1}$, U , η τάση στα άκρα του κυκλώματος, που μετρήθηκε σε Volt, I , η ένταση του ρεύματος σε Ampere. Το δεύτερο μέρος της εξίσωσης εκφράζει την διόρθωση στο ποσό θερμότητας που δόθηκε στο αέριο, λόγω της μικρής μεταβολής του όγκου ($\alpha \times P + V$), όπου V , ο όγκος του δοχείου σε lt, που πρόεκυψε από την ανύψωση του υγρού στο επικλινές μανόμετρο και $\alpha = 0.855 \text{ cm}^3 \text{ mbar}^{-1}$. Το ποσό θερμότητας που δόθηκε στο αέριο από το κύκλωμα $Q = I^2 \times R \times \Delta t = I \times U \times \Delta t$ δίνεται σε Joule ($1 \text{ J} = 1 \text{ A} \times 1 \text{ V} \times 1 \text{ s}$). Προσοχή στη μετατροπή μονάδων των δυο όρων, ώστε να συμφωνούν μεταξύ τους. Προσδιορίστε με διάδοση σφάλματος (τυχαίο σφάλμα) το αποτέλεσμα σας. Το σφάλμα του δευτέρου όρου μπορεί να απλοποιηθεί, αν είναι πολύ μικρότερο από το αντίστοιχο του πρώτου.

Ζητούμενο Β: 1. Κατασκευή διαγράμματος μεταβολής του όγκου (ΔV), ως προς τη διάρκεια του χρόνου θέρμανσης $\Delta p/\Delta t$ όπου ΔV σε ml, Δt σε sec και προσαρμογή των πειραματικών σημείων με τη βέλτιστη συνάρτηση (γραμμική προσαρμογή). Τα σφάλματα των πειραματικών μετρήσεων πρέπει να αποτυπώνονται στους αντίστοιχους άξονες. Τα διαγράμματα και το αντίστοιχο Residual Plot να συμπεριληφθούν σε ενιαίο διάγραμμα (2 panels), με κοινά όρια στην ανεξάρτητη μεταβλητή (t sec).

Αντίστοιχα, η γραμμομοριακή θερμοχωρητικότητα ενός αερίου, υπό σταθερή πίεση, περιγράφεται από την έκφραση:

$$\bar{C}_P = \frac{U I V \Delta t}{nT\Delta V} = \frac{U I R \Delta t}{P_s \Delta V}$$

όπου $\Delta t/\Delta V$, το αντίστροφο της κλίσης του διαγράμματος και P_s , η πίεση που υπάρχει στο δοχείο, δηλαδή η πίεση της ατμόσφαιρας του εργαστηρίου που μετρήθηκε κατόπιν αφαίρεσης της πίεσης που ασκεί το βάρος του εμβόλου. Προσδιορίστε το σφάλμα στο τελικό σας αποτέλεσμα.

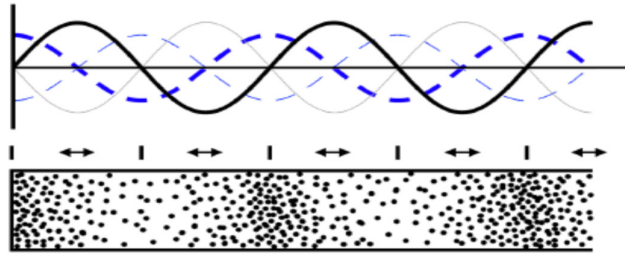
Ζητούμενο Γ: Προσδιορισμός του λόγου των γραμμομοριακών θερμοχωρητικοτήτων, $\gamma = c_p/c_v$. Παρουσίαση των αποτελεσμάτων με την μορφή πίνακα και προσδιορισμός της μέσης τιμής του $\lambda/2$ και της τυπικής απόκλισης των μετρήσεων από τις διαδοχικές θέσεις, όπου μετρήθηκε το μέγιστο πλάτος στην ένταση του ήχου του στάσιμου κύματος, που δημιουργήθηκε μέσα στον σωλήνα Kundt (το αντίστοιχο ελάχιστο της

πυκνότητας του αερίου, βλ. σχήμα κατωτέρω). Από την μέση τιμή του $\lambda/2$ και την συχνότητα f να προσδιοριστεί η ταχύτητα του ήχου στον αέρα. Προσδιορισμός της τυπική απόκλισης των μετρήσεων.

Η ταχύτητα ενός διαμήκους κύματος που διαδίδεται σε ένα ελαστικό μέσο, μέσω πυκνωμάτων και αραιωμάτων, ισούται με το μετρό ελαστικότητας όγκου ($B=-dp/-dV/V$) προς την μεταβολή της πυκνότητας.

$c = \sqrt{B/\rho}$. Επειδή οι θερμική αγωγιμότητα των αερίων είναι μικρή και η συχνότητα ταλάντωσης μεγάλη, η διάδοση της θερμότητας γίνεται αδιαβατικά και συνεπώς το γινόμενο pV^γ είναι σταθερό. Ως εκ τούτου,

$$\text{προκύπτει ότι } c = \sqrt{\gamma p / \rho} \text{ και } \gamma = \frac{M c^2}{RT}$$



Σχήμα 1: Ταλαντώσεις αερίου, κατά τη διάδοση διαμήκους κύματος. Οι κάθετες γραμμές κάτω από το διάγραμμα συμβολίζουν δεσμούς (μέγιστη πίεση – ελάχιστη ταχύτητα), ενώ τα διπλά βέλη, αντίστοιχα, αντιδεσμούς μεταβολής (ελάχιστη πίεση – μέγιστη ταχύτητα). Η διαφορά μεταξύ δυο διαδοχικών δεσμών είναι $\lambda/2$.

A3. ΠΑσκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Παρουσιάστε συνοπτικά τα αποτελέσματα σας, με μορφή πινάκων. Θα πρέπει να παρουσιάζεται επίσης το πειραματικό σφάλμα και οι αντίστοιχες τιμές της βιβλιογραφίας, καθώς επίσης, οι τιμές που προκύπτουν από το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας. Σχολιάστε τα αποτελέσματα σας. Ποιο σφάλμα είναι το καθοριστικό για κάθε διαδικασία; Γιατί το αποτέλεσμα της μέτρησης του γ μέσω της ταχύτητας του ήχου είναι πιο αξιόπιστο;

2. Δώστε το διάγραμμα της γραμμομοριακής θερμοχωρητικότητας ενός διατομικού αερίου, σε συνάρτηση με την θερμοκρασία και εξηγήστε.

3. Υπολογίστε τη συνεισφορά της υγρασίας στη θερμοχωρητικότητα του ατμοσφαιρικού αέρα. Η απόλυτη υγρασία προκύπτει αν μετατρέψουμε την τιμή της σχετικής υγρασίας, που μας δίνει το υγρασιόμετρο, σε απόλυτη και εφόσον αναχθεί στην περιεκτικότητα του ατμοσφαιρικού αέρα. Είναι σημαντική η διόρθωση αυτή;

Άσκηση Β08: Θερμοχωρητικότητα Μετάλλων

Β08.Ι Κατεύθυνσεις –Απαιτούμενα Αναφορές

1. Κατασκευή διαγραμμάτων μεταβολής της θερμοκρασίας, T , συναρτήσει του χρόνου, t , i. για κάθε προσθήκη νερού στο θερμιδόμετρο και ii. για κάθε μέταλλο, εφόσον αρχικά έχει θερμανθεί. Προσδιορίστε τη μεταβολή της θερμοκρασίας μεταξύ των καταστάσεων ισορροπίας, ΔT , για τις δύο περιπτώσεις.

2. Κατασκευή συγκριτικού διαγράμματος $T(t)$, για τα τρία μέταλλα και προσαρμόστε γραμμικά τα πειραματικά σημεία που αντιστοιχούν στις καταστάσεις ισορροπίας, πριν και μετά την εισαγωγή των θερμών μετάλλων.

Ζητούμενα:

A. Βάσει της κατεύθυνσης 1.i. να προσδιοριστεί η θερμοχωρητικότητα του θερμιδομέτρου και να περιγραφεί το είδος των διαγραμμάτων που κατασκευάστηκαν, βάσει της βιβλιογραφίας [7].

Σημείωση: Η απόδοση θερμότητας του θερμού νερού προς το θερμιδόμετρο, βάσει της αρχής διατήρησης της ενέργειας, περιγράφεται από την έκφραση:

$$C_K = c_w m_w \left(\frac{T_w - T_m}{T_m - T_K} \right)$$

όπου T_K , είναι η θερμοκρασία του θερμιδομέτρου, πριν την εισαγωγή νερού, T_m , η θερμοκρασία εξισορρόπησης του θερμικά ανισότροπου συστήματος, κατά τη μεταφορά θερμότητας από θερμό νερό θερμοκρασίας T_w , στο κρύο θερμιδόμετρο, (T_w , η θερμοκρασία του θερμού νερού), m_w η μάζα του νερού και c_w , η ειδική θερμοχωρητικότητα του νερού στη θερμοκρασία του πειράματος, η οποία λαμβάνεται από πίνακες.

B. Προσδιορισμός της ειδικής θερμοχωρητικότητας των μετάλλων που μελετήθηκαν (διαγράμματα κατεύθυνσης 1. ii). και σύγκριση των αποτελεσμάτων σας, με τις αντίστοιχες τιμές της βιβλιογραφίας.

Σημείωση: Η ποσότητα της θερμότητας που μεταφέρεται από ένα σώμα σε ένα άλλο (J. Black, 1803) και συγκεκριμένα, εν προκειμένω, από το θερμό νερό, προς το μέταλλο, q_1 , περιγράφεται από την έκφραση:

$$q_1 = m_p \times c_s \times (T_{HM} - T_m)$$

όπου m_p , η μάζα του μετάλλου, c_s , η ειδική θερμοχωρητικότητα του στερεού και T_{HM} , η θερμοκρασία του μετάλλου εντός του νερού που βράζει (θερμική ισορροπία). Εν συνεχεία, το θερμό μέταλλο, μεταφερόμενο στο θερμιδόμετρο, αποδίδει θερμικό περιεχόμενο q_2 , προς αυτό, μεταβάλλοντας τη θερμοκρασία του:

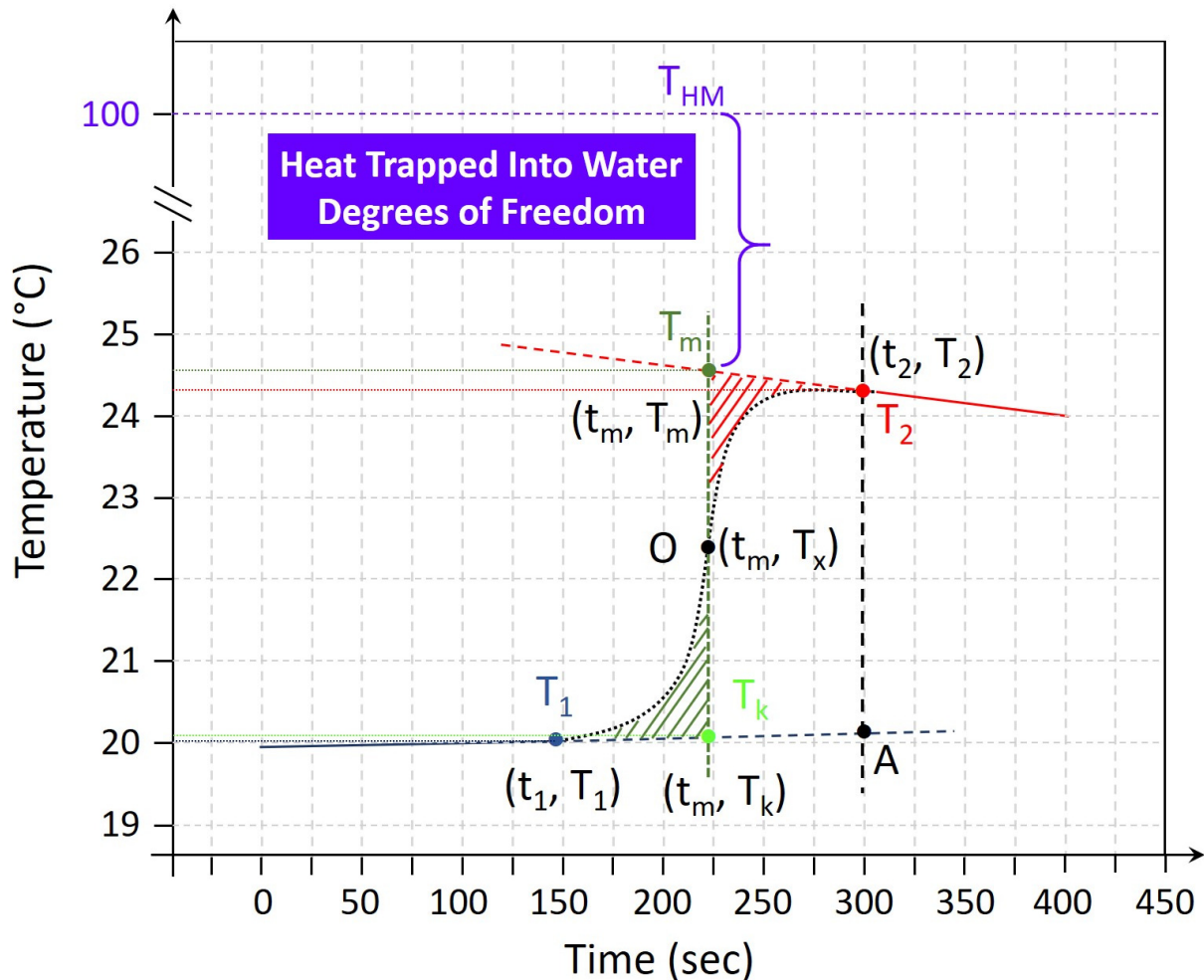
$$q_2 = (c_w \times m_w + C_K) \times (T_m - T_K)$$

όπου m_w , η μάζα του νερού, c_w , η ειδική θερμοχωρητικότητα του νερού και T_K , η θερμοκρασία του θερμιδομέτρου πριν την εισαγωγή του μετάλλου. Εφαρμόζοντας την αρχή διατήρησης της ενέργειας, $q_1 = q_2$, προκύπτει η ειδική θερμοχωρητικότητα για το κάθε μέταλλο:

$$c_s = \frac{(c_w m_w + C_K) \times (T_m - T_K)}{m_p \times (T_{HM} - T_m)}$$

Διόρθωση της παρατηρούμενης διαφοράς θερμοκρασίας $\Delta\theta$ στο θερμιδόμετρο. Η διαφορική εξίσωση της μετάδοσης θερμότητας (Νόμος της ψύξης $\frac{dq}{dt} = -k(T - T_s)$) μπορεί να επιλυθεί γραφικά προκειμένου να δώσει μια ιδανική στιγμή t_m στις οποίας την προέκταση εξισορροπεί την απώλεια της θερμότητας στο στάδιο III, με το κέρδος στο στάδιο I. Για τη στιγμή αυτή το σύστημα συμπεριφέρεται πλήρως μονωμένα και αδιαβατικά και χωρίς υστερήσεις. Η μέθοδος των μίξεων συμπεριλαμβάνει τη θέρμανση του κρύου θερμιδομέτρου, από το ζεστό νερό θερμοκρασίας T_w , για το πρώτο προκαταρκτικό πείραμα, είτε την θέρμανση

του κρύου θερμιδόμετρου και του νερού που περιέχεται σε αυτό, από το θερμό μέταλλο που προστίθεται κατά το κυρίως πείραμα.



Σχήμα 1. Προσδιορισμός του χρονικού σημείου t_m (sec), κατόπιν ολοκλήρωσης και εξίσωση των γραμμοσκιασμένων εμβαδών, όπου T_k ($^{\circ}\text{C}$): η προέκταση της ευθείας $y = ax + b$, της πρώτης φάσης ισορροπίας (φάση I), στον χρόνο t_m και T_m ($^{\circ}\text{C}$): η προέκταση της ευθείας $y = a_1x + b_1$, της δεύτερης φάσης ισορροπίας (φάση III), στον χρόνο t_m (sec). Η T_m ($^{\circ}\text{C}$) τόσο κατά την προσθήκη θερμού νερού στο άδειο θερμιδόμετρο, όσο και στην περίπτωση προσθήκης του θερμού μετάλλου στο κρύο ύδωρ του θερμιδομέτρου, δηλώνει τη θερμοκρασία εξισορρόπησης του συστήματος, κατόπιν κατανομής της επιπλέον θερμότητας στους εσωτερικούς βαθμούς των μέσων.

Αριθμητικό παράδειγμα προσδιορισμού του χρονικού σημείου t_m (sec), μέσω ολοκλήρωσης.

Η γεωμετρική συνθήκη που οφείλει να πληρείται για τον προσδιορισμό του t_m είναι η ισοεμβαδικότητα των γραμμο-σκιασμένων περιοχών του σχήματος 1. Τα εμβαδά μπορούν να προσδιοριστούν με τη βοήθεια του λογισμικού Origin, μέσω χρονικής ολοκλήρωσης της μεταβολής της θερμοκρασίας, από το αρχικό, έως το τελικό σημείο της διεργασίας.

A. Καθορισμός των οριακών σημείων και ολοκλήρωση (Το σχήμα 1 είναι ποιοτικό και δεν περιγράφει με ακρίβεια τις χρησιμοποιούμενες τιμές). Έστω ότι στο παράδειγμα του σχήματος 1, το τελευταίο σημείο της πρώτης φάσης ισορροπίας έχει συντεταγμένες $(t_1, T_1) = (120 \text{ s}, 20.5 \text{ }^{\circ}\text{C})$, ενώ το χρονικό διάστημα, κατά το οποίο μεταφέρεται θερμότητα από το μέταλλο προς το ύδωρ και το θερμιδόμετρο αντιστοιχεί σε $\Delta t = t_2 - t_1$ (φάση II). Τέλος, από τη χρονική στιγμή t_2 , αρχίζει η τρίτη, αργή φάση της εξισορρόπησης του θερμικά

ανισότροπου μίγματος θερμού μετάλλου – ψυχρού ύδατος, $(t_2, T_2) = (270 \text{ s}, 23.7 \text{ }^\circ\text{C})$. Η χρονική ολοκλήρωση γίνεται με επισήμανση των αρχικών και τελικών χρονικών σημείων (analysis–mathematic–integration) και δίνει το συνολικό εμβαδόν της επιφάνειας [προεκτείνοντας κάθετα προς την τετμημένη του γραφήματος στα δύο ακραία όρια χρονικής ολοκλήρωσης, $z_1: (t_1, 0)$ και $z_2 (t_2, 0)$] $z_1T_1OT_2Az_2 = 3459 \text{ }^\circ\text{C s}^{-1}$. Το εμβαδόν αυτό συμπεριλαμβάνει δηλαδή επιπρόσθετα την περιοχή κάτω από την καμπύλη ενδιαφέροντος, μέχρι τον άξονα του μηδενός – ο οποίος δεν φαίνεται στο διάγραμμα – και ως εκ τούτου η επιφάνεια, που δεν αφορά στη διαδικασία, πρέπει να αφαιρεθεί.

Β.Αφαίρεση του εμβαδού $z_1T_1Az_2$. Πρόκειται για ορθογώνιο παραλληλόγραμμο με πλευρές $T_1-0 = 20.5 \text{ }^\circ\text{C}$ και $t_2-t_1 = (270-120) \text{ s}$. Συνεπώς η επιφάνεια του $z_1T_1Az_2 = 3075 \text{ }^\circ\text{C s}^{-1}$. Η αφαίρεση $z_1T_1OT_2Az_2 - z_1T_1Az_2$ μας δίνει την επιφάνεια του χωρίου $T_1OT_2A = 384 \text{ }^\circ\text{C s}^{-1}$.

Γ. Εξίσωση εμβαδών. Αν τώρα το $OT_1T_k=OT_mT_2$ τότε αντί για το εμβαδόν του αρχικού χωρίου έχουμε το ορθογώνιο παραλληλόγραμμο $T_kAT_2T_m$ του οποίου το εμβαδόν είναι:

$$384 \text{ }^\circ\text{C s}^{-1} = (23.7-20.5) \times (270-x) \text{ και } x = t_m = 150 \text{ s} \text{ (συνθήκη αποδεκτής λύσης: } t_2 > x = t_m > t_1).$$

Προσδιορισμός T_k και T_m : Αντικατάσταση του t_m στην εξίσωση της φάσης I δίνει το T_k και αντικατάσταση του t_m στην εξίσωση της φάσης III δίνει το T_m .

B08.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Σχολιάστε τα αποτελέσματα προσδιορισμού της ειδικής θερμοχωρητικότητας με τα σφάλματά τους και αντιπαραβάλλετε με τις τιμές της βιβλιογραφίας. Διερευνήστε την ισχύ του νόμου των Dulong–Petit, κατά τη σύγκριση των πειραματικών γραμμομοριακών θερμοτήτων των στερεών που μελετήθηκαν με τις αναμενόμενες τιμές και αναφέρετε τις παρατηρήσεις σας.
2. Ποια είναι η φυσική σημασία της συνάρτησης επιμερισμού της χαρακτηριστικής θερμοκρασίας των Einstein και Debye, $\vartheta_E = h \times \nu_E/k$ και $\vartheta_D = h \times \nu_m/k$;
3. Ποια ήταν η φυσική σημασία της προσέγγισης Einstein και Debye στη θερμοχωρητικότητα.

Άσκηση Β10: Ηλεκτροχημεία

Β10.I Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Κατασκευή διαγραμμάτων μεταβολής όγκου, ΔV , συναρτήσεως του εφαρμοσμένου φορτίου στο διάλυμα, Q , και των υπολειμματικών διαγραμμάτων τους (Residual Plots), για την παραγωγή H_2 και O_2 . Γραμμική προσαρμογή των πειραματικών σημείων, τόσο κατά τον κορεσμό, όσο και το πείραμα προσδιορισμού της σταθεράς Faraday και κατασκευή συγκριτικού διαγράμματος για τα δυο αέρια, συμπεριλαμβάνοντας τα Residual Plots σε ένα διάγραμμα (2 panels).

Επισημάνσεις: i. Τα διαγράμματα συνίστανται από δύο panels (πάνω – κάτω): α. Πειραματικά δεδομένα και προσαρμογή τους και β. Residual Plot. Τα σφάλματα κάθε πειραματικής μέτρησης πρέπει να απεικονίζονται στο άνω γράφημα (panel α) της γραφικής παράστασης. ii. Εστιάστε στις διαφορές των residual plots μεταξύ κορεσμού και πειράματος προσδιορισμού της σταθεράς Faraday, για το κάθε αέριο.

Ζητούμενα:

A. Προσδιορισμός της σταθεράς Faraday χρησιμοποιώντας τα δεδομένα των δύο αερίων, συγκρίνετε τα αποτελέσματα και συγκρίνετε με την αναμενόμενη τιμή της, συνεκτιμώντας τα πειραματικά σας σφάλματα. Χρησιμοποιώντας τα residual plots και παραθέτοντας τα συστηματικά σφάλματα των μετρήσεων αναλυτικά εξηγήστε τις παρατηρήσεις σας και τις όποιες αποκλίσεις εμφανίζονται σε κάθε περίπτωση (π.χ., απόκλιση από γραμμικότητα σε συγκεκριμένο εύρος μεταβολών του όγκου για κάθε αέριο). Χρησιμοποιώντας την έκφραση $F = N_A \times e$, προσδιορίστε το στοιχειώδες φορτίο του ηλεκτρονίου και εξηγήστε ποια μέτρηση, μεταξύ παραγωγής H_2 και O_2 εμπιστεύεστε περισσότερο.

B. Προσδιορίστε το φορτίο που διήλθε από το διάλυμα για κάθε χρονικό διάστημα, dt , ελήφθησαν οι μεταβολές του όγκου, λαμβάνοντας υπόψη τη μεταβολή της έντασης του ρεύματος, κατά τη διάρκεια της ηλεκτρόλυσης.

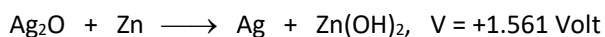
Επισήμανση: Το χρονικό διάστημα κάθε μέτρησης, ξεκινάει πάντα από χρόνο $t = 0$ s, καθώς καταγράφετε τη συνολική μεταβολή του όγκου κάθε φορά.

Β10.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

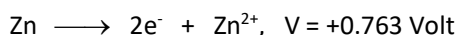
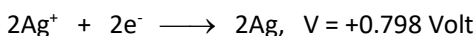
1. Ποια είναι τα προϊόντα των αντιδράσεων (πρωτογενείς και δευτερογενείς αντιδράσεις) στα υδατικά διαλύματα $NaCl$ και $AgNO_3$, λαμβάνοντας υπόψη τη διάσταση του διαλύτη;

2. Αναφέρετε συγκριτικά τις διαφορές μεταξύ γαλβανικών και ηλεκτρολυτικών στοιχείων παρουσιάζοντάς τις συνοπτικά, με τη μορφή πίνακα.

3. Κατά τη μελέτη της εξάρτησης της απαιτούμενης ηλεκτρεγερτικής δύναμης (ΗΕΔ), από τη θερμοκρασία (πίνακας 1), για τη συνολική οξειδο-αναγωγική αντίδραση:



που αναλύεται περαιτέρω στις ημιαντιδράσεις:



εφόσον ορίσετε τις πρότυπες συνθήκες, υπολογίστε τις πρότυπες τιμές για: την ελεύθερη ενέργεια Gibbs, ΔG° , την ενθαλπία, ΔH° και την εντροπία, ΔS° , της αντίδρασης, χρησιμοποιώντας τα δεδομένα του πίνακα 1.

Πίνακας 1. Θερμοκρασιακή εξάρτηση ΗΕΔ.

| T (K) | 273 | 280 | 287 | 292 | 298 | 302 | 309 | 314 | 316 |
|---------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| ΗΕΔ (V) | 1.5958 | 1.5947 | 1.5936 | 1.5928 | 1.5920 | 1.5918 | 1.5912 | 1.5907 | 1.5906 |

Άσκηση B13: Ιξωδομετρία

B13.I Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Κατασκευή διαγραμμάτων του φυσικού λογάριθμου του συντελεστή ιξώδους, $\ln(\eta)$, συναρτήσει του αντίστροφου της θερμοκρασίας, $1/T$, (Arrhenius–Guzman) και των υπολειμματικών διαγραμμάτων τους (Residual Plots), για το σύνολο των πειραματικών μετρήσεων, καθώς και για τις μέσες τιμές τους, σε κάθε T . Αποτύπωση των σφαλμάτων σε κάθε πειραματικό σημείο (απαιτείται διάδοση σφαλμάτων) και γραμμική προσαρμογή των πειραματικών σημείων. Τα διαγράμματα και τα αντίστοιχα Residual Plots συμπεριλαμβάνονται σε ένα γράφημα (2 panels), με κοινά όρια στην ανεξάρτητη μεταβλητή ($1/T$). Οι τιμές του συντελεστή ιξώδους και της θερμοκρασίας πρέπει να αποτυπώνονται ως κατοπτρικοί άξονες (mirror axes), στο γράφημα.

Επισημάνσεις: i. Τα διαγράμματα συνίστανται από δύο panels (πάνω – κάτω): α. Πειραματικά δεδομένα και προσαρμογή τους και β. Residual Plot. Τα σφάλματα κάθε πειραματικής μέτρησης πρέπει να απεικονίζονται στο άνω γράφημα (panel α) της γραφικής παράστασης (απαιτείται διάδοση σφαλμάτων). ii. Ο συντελεστής του ιξώδους ($10^{-1} \text{ Nt s cm}^{-2} = 1 \text{ cPoise}$) προσδιορίζεται μέσω της έκφρασης:

$$\eta = F \times G \times t$$

όπου, F , ο συντελεστής της σφαίρας που χρησιμοποιήθηκε σε $\text{Nt g}^{-1} \text{ cm}^{-2}$, G , η επιπλέον μάζα που προστέθηκε στο δίσκο του ζυγού σε g και t , ο χρόνος σε s .

Ζητούμενα:

A. Προσδιορισμός της ενέργειας ενεργοποίησης της ιξώδους ροής, από το γράφημα Arrhenius–Guzman χρησιμοποιώντας τις εκφράσεις:

i. $\eta = Q \times \exp(+Ea/RT)$, που ισοδυναμεί με: $\ln(\eta) = \ln(Q) + (Ea/R) \times (1/T)$ και

ii. $\eta = q \times T^f \times \exp(+Ea/RT)$, (η τιμή της παραμέτρου f τείνει στο 2)

B. Κατασκευή συγκριτικού διαγράμματος απόκλισης από τις πειραματικές τιμές για 100 % και 99 % καθαρότητα γλυκερόλης ($\text{H}_2\text{C}(\text{OH})\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2(\text{OH})$, $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$): Αποτύπωση των πειραματικών τιμών για την 99.5 % γλυκερόλη που χρησιμοποιήθηκε στο πείραμα, συνδυαστικά με τις αντίστοιχες τιμές του $\ln(\eta)$ vs $1/T$, που φαίνονται στον πίνακα 1. Μέσω κατάλληλης προσαρμογής, να προσδιοριστεί η επί τοις % ποσοστιαία απόκλιση από την πειραματική τιμή, για την κάθε θερμοκρασία, που διεξήχθησαν οι μετρήσεις και να αποτυπωθούν σε ένα δεύτερο panel (πάνω – κάτω), μαζί με το συγκριτικό διάγραμμα πειραματικών και θεωρητικών δεδομένων (deviation plot).

B13.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Συγκρίνετε τη θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή ιξώδους στην αέρια και υγρή κατάσταση και εξηγήστε τις διαφορές;

2. Εξηγήστε για ποιον λόγο ο συντελεστής ιξώδους της αιθανόλης είναι μεγαλύτερος από τον αντίστοιχο του νερού και εν συνεχεία, γιατί του αιθυλ-αιθέρα είναι μικρότερος και από τους άλλους δύο.

Πίνακας 1. Θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή ιξώδους για μίγματα γλυκερόλης/νερού.

| Glyc. % Wt. | Temperature (°C) | | | | | | | | | | |
|----------------|------------------|-------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| | 0 | 10 | 20 | 30 | 40 | 50 | 60 | 70 | 80 | 90 | 100 |
| 0* | 1.792 | 1.308 | 1.005 | 0.8007 | 0.6560 | 0.5494 | 0.4688 | 0.4061 | 0.3565 | 0.3165 | 0.2838 |
| 10 | 2.44 | 1.74 | 1.31 | 1.03 | 0.826 | 0.680 | 0.575 | 0.500 | — | — | — |
| 20 | 3.44 | 2.41 | 1.76 | 1.35 | 1.07 | 0.879 | 0.731 | 0.635 | — | — | — |
| 30 | 5.14 | 3.49 | 2.50 | 1.87 | 1.46 | 1.16 | 0.956 | 0.816 | 0.690 | — | — |
| 40 | 8.25 | 5.37 | 3.72 | 2.72 | 2.07 | 1.62 | 1.30 | 1.09 | 0.918 | 0.763 | 0.668 |
| 50 | 14.6 | 9.01 | 6.00 | 4.21 | 3.10 | 2.37 | 1.86 | 1.53 | 1.25 | 1.05 | 0.910 |
| 60 | 29.9 | 17.4 | 10.8 | 7.19 | 5.08 | 3.76 | 2.85 | 2.29 | 1.84 | 1.52 | 1.28 |
| 65 | 45.7 | 25.3 | 15.2 | 9.85 | 6.80 | 4.89 | 3.66 | 2.91 | 2.28 | 1.86 | 1.55 |
| 67 | 55.5 | 29.9 | 17.7 | 11.3 | 7.73 | 5.50 | 4.09 | 3.23 | 2.50 | 2.03 | 1.68 |
| 70 | 76 | 38.8 | 22.5 | 14.1 | 9.40 | 6.61 | 4.86 | 3.78 | 2.90 | 2.34 | 1.93 |
| 75 | 132 | 65.2 | 35.5 | 21.2 | 13.6 | 9.25 | 6.61 | 5.01 | 3.80 | 3.00 | 2.43 |
| 80 | 255 | 116 | 60.1 | 33.9 | 20.8 | 13.6 | 9.42 | 6.94 | 5.13 | 4.03 | 3.18 |
| 85 | 540 | 223 | 109 | 58 | 33.5 | 21.2 | 14.2 | 10.0 | 7.28 | 5.52 | 4.24 |
| 90 | 1310 | 498 | 219 | 109 | 60.0 | 35.5 | 22.5 | 15.5 | 11.0 | 7.93 | 6.00 |
| 91 | 1590 | 592 | 259 | 127 | 68.1 | 39.8 | 25.1 | 17.1 | 11.9 | 8.62 | 6.40 |
| 92 | 1950 | 729 | 310 | 147 | 78.3 | 44.8 | 28.0 | 19.0 | 13.1 | 9.46 | 6.82 |
| 93 | 2400 | 860 | 367 | 172 | 89 | 51.5 | 31.6 | 21.2 | 14.4 | 10.3 | 7.54 |
| 94 | 2930 | 1040 | 437 | 202 | 105 | 58.4 | 35.4 | 23.6 | 15.8 | 11.2 | 8.19 |
| 95 | 3690 | 1270 | 523 | 237 | 121 | 67.0 | 39.9 | 26.4 | 17.5 | 12.4 | 9.08 |
| 96 | 4600 | 1580 | 624 | 281 | 142 | 77.8 | 45.4 | 29.7 | 19.6 | 13.6 | 10.1 |
| 97 | 5770 | 1950 | 765 | 340 | 166 | 88.9 | 51.9 | 33.6 | 21.9 | 15.1 | 10.9 |
| 98 | 7370 | 2460 | 939 | 409 | 196 | 104 | 59.8 | 38.5 | 24.8 | 17.0 | 12.2 |
| 99 | 9420 | 3090 | 1150 | 500 | 235 | 122 | 69.1 | 43.6 | 27.8 | 19.0 | 13.3 |
| 100 | 12070 | 3900 | 1410 | 612 | 284 | 142 | 81.3 | 50.6 | 31.9 | 21.3 | 14.8 |

* Viscosity of water taken from "Properties of Ordinary Water-Substance," N. E. Dorsey, p. 184. New York (1940)

Πίνακας 2. Θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή ιξώδους για το νερό, την αιθανόλη και το διαιθυλαιθέρα. (Source: David R. Lide, ed., CRC Handbook of Chemistry and Physics, Internet Version 2005, <<http://www.hbcnetbase.com>>, CRC Press, Boca Raton, FL, 2005.)

| Θερμοκρασία (Κ) | H ₂ O | CH ₃ CH ₂ OH | CH ₃ CH ₂ OCH ₂ CH ₃ |
|-----------------|------------------|------------------------------------|--|
| 253.15 | | | 0.362 |
| 263.15 | | | |
| 273.15 | | 1.773 | 0.2842 |
| 283.15 | | 1.466 | |
| 293.15 | 1.002 | 1.200 | 0.2332 |
| 303.15 | 0.7975 | 1.003 | 0.2098 |
| 313.15 | 0.6529 | 0.834 | 0.197 |
| 323.15 | 0.5468 | 0.702 | |
| 333.15 | 0.4665 | 0.592 | 0.166 |
| 343.15 | 0.4042 | 0.504 | |
| 353.15 | 0.3547 | | 0.140 |
| 363.15 | 0.3147 | | |
| 373.15 | | | 0.118 |

Συνοπτικός Οδηγός Συγγραφής Εργαστηριακής Αναφοράς

1. Η εργαστηριακή αναφορά

Η αναφορά της εργαστηριακής άσκησης αποτελεί το μέσο επικοινωνίας του πειραματιστή με τον επιστημονικό κόσμο. Αποτυπώνει με ακρίβεια και σαφήνεια το σκοπό και τη βασική θεωρία του πειράματος, τη μεθοδολογία που ακολουθήθηκε, τα υλικά και την οργανολογία που χρησιμοποιήθηκε (πειραματική συσκευή, διάταξη), παρουσιάζει τα δεδομένα που ελήφθησαν κατά τις πειραματικές μετρήσεις και τους υπολογισμούς, σχολιάζει την ακρίβεια των μετρήσεων και παραθέτει τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα της πειραματικής εργασίας.

Ως εκ τούτου είναι εξαιρετικά σημαντικό το περιεχόμενό και η δομή της αναφοράς να παρέχουν ακριβή, ουσιαστική και διαυγή περιγραφή, των πειραματικών μετρήσεων και των συνθηκών καθώς και των αποτελεσμάτων και συμπερασμάτων.

Στη συνέχεια δίδονται αναλυτικά οδηγίες σχετικά με τη δομή και τη μορφοποίηση της εργαστηριακής αναφοράς.

2. Δομή και Μορφοποίησης της Αναφοράς

2.1. Δομή

Στις σελίδες 4-12 παρατίθεται αναλυτικό υπόδειγμα με σύντομη περιγραφή του περιεχομένου και της οργάνωσης της αναφοράς.

Η προτεινόμενη δομή της αναφοράς για τα Εργαστήρια Φυσικοχημείας θα πρέπει να τηρείται με συνέπεια, ώστε η εργασία όλων των ομάδων να αξιολογείται υπό το ίδιο πρίσμα. Επίσης, όλα τα μέλη κάθε ομάδας πρέπει να έχουν την πλήρη εποπτεία του περιεχομένου της αναφοράς έτσι ώστε το κείμενο στο σύνολό του να χαρακτηρίζεται από ενιαίο τρόπο γραφής, δομή και μορφοποίηση επιτρέποντας στον αναγνώστη (και τον αξιολογητή) να αποκομίσει ακριβή και σαφή εικόνα των πειραματικών εργασιών, των μετρήσεων της ανάλυσης των αποτελεσμάτων και των συμπερασμάτων.

Επισημαίνεται ότι σοβαρή παρέκκλιση από τις οδηγίες σύνταξης αναφορών ενδέχεται να επιφέρει συνέπειες στην τελική βαθμολόγησή τους.

2.2. Μορφοποίηση

Η ομοιογενής μορφοποίηση του κειμένου των αναφορών είναι απαραίτητη έτσι ώστε η αξιολόγησή τους να αφορά αποκλειστικά στο περιεχόμενο των γεγραμμένων ενώ συγχρόνως οι συγγραφείς να αποκτήσουν δεξιότητες ορθής και εύληπτης παρουσίασης πειραματικών αποτελεσμάτων.

Στη συνέχεια περιγράφονται οι απαιτήσεις για τη συγγραφή, παρουσίαση, εκτύπωση και βιβλιοδεσία της αναφοράς.

A. Γραμματοσειρά (Font και FontSize)

i) *Τίτλοι κεφαλαίων και υποκεφαλαίων*: **Bold** και αριθμημένοι.

Times New Roman 14 ή Calibri 14 ή Arial 12

ii) *Κυρίως Κείμενο*:

Times New Roman 12 ή Calibri 12 ή 11 ή Arial 10

iii) Χρήση αυτούσιου κειμένου από βιβλιογραφία: *Italics*

«Εντός εισαγωγικών και με πλάγιους χαρακτήρες»

B. Διάστιχο

Δηλώνει την απόσταση μεταξύ των γραμμών και επιλέγεται **1.5 γραμμή**, ώστε το κείμενο να είναι ευανάγνωστο.

Γ. Κατανομή – Στοίχιση κειμένου στις σελίδες

Το κείμενο της αναφοράς παρατίθεται συγγράφεται σε μία στήλη και στοιχίζεται ομοιόμορφα ως προς τα άκρα της σελίδας επιλέγοντας την πλήρη στοίχιση κειμένου από τις επιλογές του κειμενογράφου (Justify, ctrl+J). Οι πίνακες, τα διαγράμματα, οι αντιδράσεις και οι εξισώσεις προτείνεται να στοιχίζονται στο κέντρο της σελίδας ή της γραμμής, όπου αναφέρονται (Center, ctrl+E).

Δ. Περιθώρια Σελίδων (Margins)

Τα περιθώρια θα πρέπει να έχουν οριστεί σε όλες τις αναφορές στην επιλογή Κανονικά (Normal): Αριστερά και Δεξιά: **1.25"** και Πάνω και Κάτω: **1.00"**

Ε. Εκτύπωση Αναφοράς

Συστήνεται, για οικονομία, μείωση του όγκου των εντύπων που παράγετε και πρωτίστως για την ελαχιστοποίηση της επιβάρυνσης του περιβάλλοντος, η αναφορά να εκτυπώνεται χρησιμοποιώντας και τις δύο όψεις των φύλλων Α4, εκτός από περιπτώσεις που απαιτείται να υπάρχει κενή σελίδα, όπως για παράδειγμα, η εσωτερική σελίδα του εξωφύλλου.

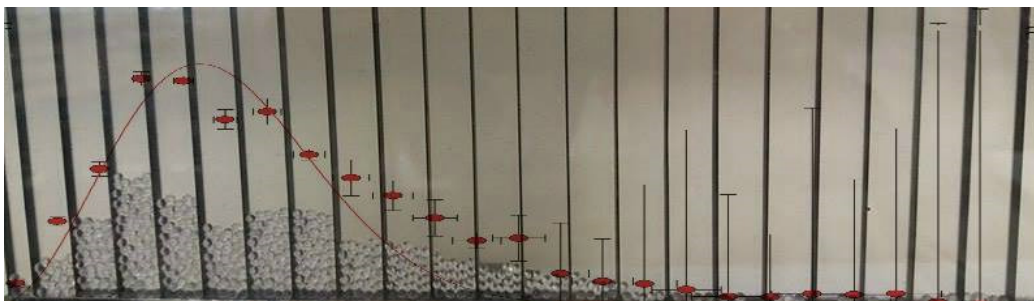
Ζ. Βιβλιοδεσία

Οποιοσδήποτε τρόπος βιβλιοδεσίας είναι αποδεκτός, με μοναδική εξαίρεση τη χρήση συνδετήρα. Σε περίπτωση που οι αναφορές συρράπτονται συστήνεται να παραδίδονται εντός ζελατίνας, ώστε να είναι λιγότερο πιθανή η όποια ακούσια φθορά τους, κατά την παράδοση και διόρθωσή τους.



ΤΙΤΛΟΣ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΗΣ ΑΣΚΗΣΗΣ

[Υπότιτλος (αν υπάρχει)]



ΟΜΑΔΑ X (X : αριθμός ομάδας)

Βασίλειος Παπαδημητρίου^{α,1}, Νικόλαος Στρατηγάκης^{α,2}, Δημήτριος Άγγλος^{α,3}

^α Εργαστήριο Φυσικοχημείας, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστημιούπολη Ηρακλείου, Βασιλικά – Βούτες 70013, Πανεπιστήμιο Κρήτης

¹bpapadim@uoc.gr; ²stratign@uoc.gr; ³anglos@uoc.gr

Μεταπτυχιακός/ή Βοηθός :

Εξώφυλλο

Περιέχει τον τίτλο της άσκησης, την ημερομηνία διεξαγωγής της, τον υπεύθυνο μεταπτυχιακό βοηθό της άσκησης, την ημερομηνία παράδοσης, την ομάδα (π.χ. Α1), τα ονόματα των συγγραφέων (με τον Α.Μ.) και τον κοινό τους σύνδεσμο (affiliation), με το Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου Κρήτης. Το εξώφυλλο πρέπει να είναι οργανωμένο άρτια και μπορεί να περιλαμβάνει μία περιγραφική για την άσκηση εικόνα (graphical abstract).

Υπόδειγμα Εργαστηριακής Αναφοράς

(Τίτλος Εργαστηριακής Άσκησης)

Περίληψη (Μία έως δύο παράγραφοι)

Σύντομα, περιεκτικά και με ακρίβεια, αποφεύγοντας μη ουσιαστικές λεπτομέρειες, οι συγγραφείς περιγράφουν το αντικείμενο του πειράματος και τη μέθοδο που χρησιμοποιήθηκε, αναφέρουν την πειραματική διάταξη, τα μεγέθη που μετρήθηκαν και τις συνθήκες των μετρήσεων και συνοψίζουν το/τα κύριο/α αποτέλεσμα/τα ή συμπέρασμα/τα της άσκησης. Το συγκεκριμένο τμήμα της αναφοράς είναι ιδιαίτερα σημαντικό, καθώς βοηθάει τους συγγραφείς να οργανώσουν το πλαίσιο σύνταξης και τη δομή της αναφοράς ενώ δίδει στον αναγνώστη συνοπτικά τη συνολική εικόνα της εργασίας. Ως εκ τούτου συστήνεται η περίληψη να συγγράφεται εξαρχής (πριν τη συγγραφή του κυρίως κειμένου).

1. Σκοπός Πειράματος

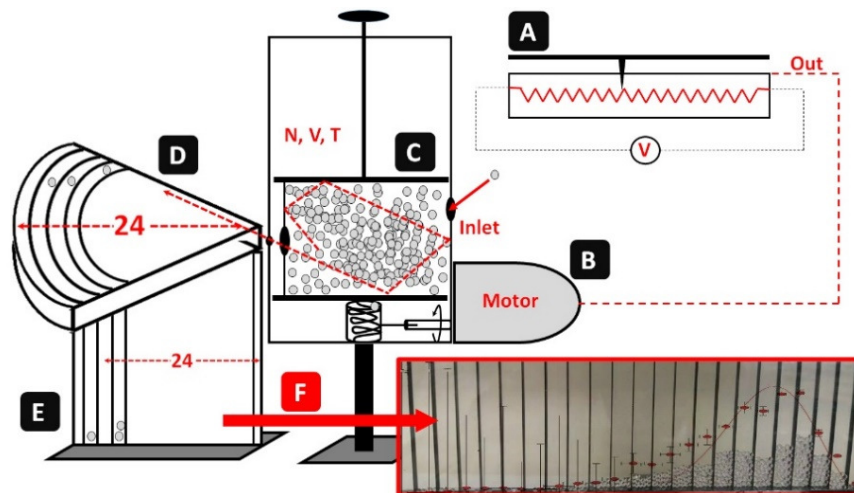
Στη συγκεκριμένη ενότητα της αναφοράς οι συγγραφείς καλούνται να περιγράψουν εν συντομία το αντικείμενο και το σκοπό της άσκησης παρουσιάζοντας τη λογική της μεθόδου και των μετρήσεων. Με τον τρόπο αυτό προσελκύουν το ενδιαφέρον του αναγνώστη και κοινωνούν στον επιστημονικό κόσμο γιατί είναι σημαντική η εργασία τους.

2. Πειραματικό Μέρος

Στο Πειραματικό Μέρος παρατίθενται αναλυτικά η πειραματική διάταξη¹ (περιγραμματική απεικόνιση, block diagram), περιγράφεται λεπτομερώς η πειραματική διαδικασία και οι συνθήκες του πειράματος ενώ παρατίθεται το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο στο οποίο στηρίζεται το πείραμα, π. χ., νόμοι

¹ Απαιτείται αναφορά στα επί μέρους όργανα, που χρησιμοποιούνται στην πειραματική διαδικασία και τα χαρακτηριστικά τους, π.χ. «χρησιμοποιήθηκε πηγή ακτινοβολίας λέιζερ He-Ne συνεχούς λειτουργίας, ισχύος 10 mW, που εκπέμπει στα 632.8 nm (κατασκευαστής: Melles-Griot)»

φυσικής ή χημείας και οι σχετικές μαθηματικές εκφράσεις που χρησιμοποιήθηκαν για την ανάλυση των αποτελεσμάτων. Όπου χρειάζεται δίδεται αναφορά στη βιβλιογραφία.²



Σχήμα 1. Περιγραμμάτικη απεικόνιση της διάταξης προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκε για τον προσδιορισμό της κατανομής ταχυτήτων κατά Maxwell, σε ιδανικό αέριο. [1]

Επιπλέον, στο συγκεκριμένο τμήμα παρατίθενται ενδεχόμενα πειράματα ελέγχου και τροποποιήσεις της πειραματικής διάταξης και/ή διαδικασίας εξηγώντας το λόγο που διενεργήθηκαν και το σκοπό τους. Ιδιαίτερη προσοχή πρέπει να δοθεί στο γεγονός ότι στο πειραματικό μέρος ΔΕΝ παρατίθενται αποτελέσματα.

3. Αποτελέσματα

Επίσης, παρουσιάζονται οι μέθοδοι επεξεργασίας και ανάλυσης των πειραματικών δεδομένων με λεπτομερή αναφορά στα πειραματικά σφάλματα και την επίδρασή αυτών στην ακρίβεια των μετρήσεων και των υπολογισμών. Η ενότητα αυτή αποτελεί το κυριότερο τμήμα της αναφοράς, όπου οι συγγραφείς παραθέτουν με ακριβή και κατανοητό, για τον αναγνώστη, τρόπο τα δεδομένα από τις πειραματικές μετρήσεις (raw data), τις μεθόδους επεξεργασίας και ανάλυσης των πειραματικών δεδομένων και λεπτομερή αναφορά στα πειραματικά σφάλματα και την επίδρασή αυτών στην ακρίβεια των μετρήσεων και των υπολογισμών (ανάλυση σφάλματος).

² Δηλαδή, πού ευρίσκονται οι οδηγίες που ακολουθήσαμε, π.χ. «η πειραματική διαδικασία που ακολουθήσαμε περιγράφεται στο εγχειρίδιο των εργαστηριακών ασκήσεων»

Πειραματικές μετρήσεις

Στην υποενότητα αυτή παρουσιάζονται τα πειραματικά δεδομένα υπό μορφή πινάκων ή φασμάτων. Οι πίνακες πρέπει να είναι κατάλληλα οργανωμένοι και ευανάγνωστοι, εισάγονται με παραπομπή εντός του κειμένου, αριθμούνται κατ' αύξουσα σειρά (Πίνακας 1) ενώ το περιεχόμενό τους δίδεται με τη μορφή κεφαλίδας (μαζί με την αρίθμηση ακριβώς πάνω από τον πίνακα). Είναι σημαντικό κάθε πίνακας να έχει ένα χαρακτηριστικό τίτλο, ο οποίος αναφέρεται στα πειραματικά δεδομένα που εμπεριέχονται σ' αυτόν. Κάθε στήλη πρέπει να περιγράφει με σαφήνεια την ποσότητα, που μετράται ή υπολογίζεται καθώς και τις αντίστοιχες μονάδες. Επίσης πρέπει να σημειώνονται οι σχετικές πειραματικές συνθήκες/παράμετροι, ώστε ο αναγνώστης να έχει ολοκληρωμένη εικόνα των μετρήσεων. Επεξηγήσεις των περιεχομένων του πίνακα, ώστε να μην υπάρχουν επαναλήψεις εντός του πίνακα, αλλά και για να περιοριστεί το περιεχόμενο των κελιών, δίνονται, κατόπιν παραπομπής εντός του πίνακα, ως υποσημείωση στον πίνακα (κάτω μέρος του πίνακα).

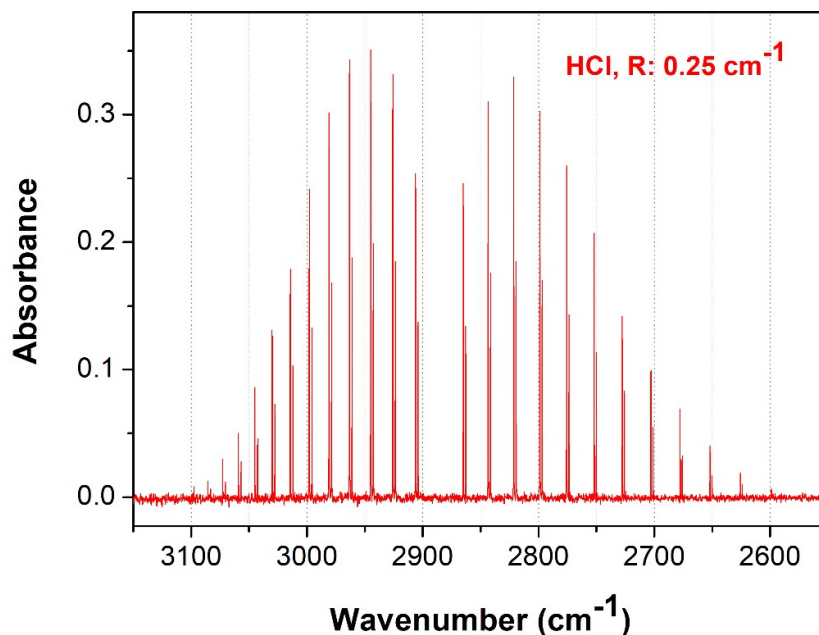
Πίνακας 1. Ενεργειακές καταστάσεις β-καροτένιου^α

| Κατάσταση | Συμμετρία ^β | Ενέργεια / cm ⁻¹ |
|-----------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| Θεμελιώδης | | |
| S ₀ | ¹ A _g | 0 |
| Διεγερμένες (singlet) | | |
| S ₁ | ¹ A _g | 14300 |
| S ₂ | ¹ B _u | 20400 |
| S ₃ | ¹ B _u | 33500 |
| Διεγερμένες (triplet) | | |
| T ₁ | | 6400 |
| T ₂ | | 14500 |
| T ₃ | | 25500 |

^α Αναφορές {2, 3}

^β Η συμμετρία των καταστάσεων δίδεται με βάση τις αντίστοιχες ΜΑΠ (μη αναγώγιμες αναπαράστασεις) της ομάδας συμμετρίας σημείου C_{2h}.

Στην περίπτωση που τα πρωτογενή δεδομένα που συλλέγονται είναι φάσματα, τότε παρουσιάζονται τα φάσματα (Διάγραμμα 1) με τις κατάλληλες επεξηγήσεις (άξονες γ , χ) και, όπου χρειάζεται, ακολουθούμενα από τους σχετικούς πίνακες.



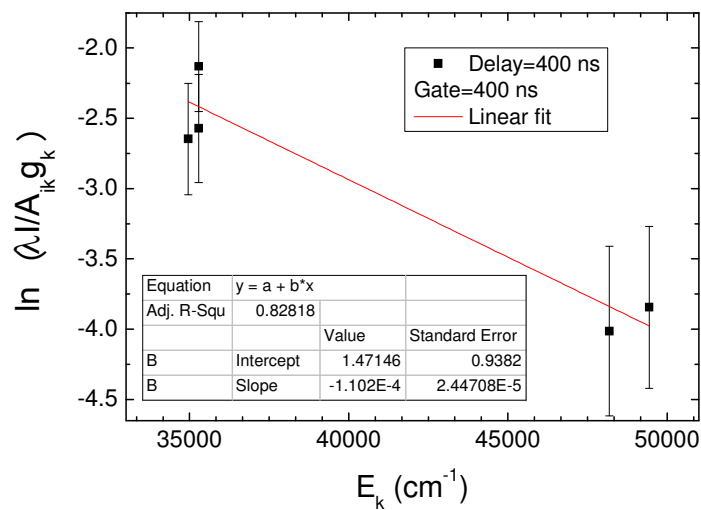
Διάγραμμα 1. Φάσμα απορρόφησης υπέρυθρου (IR) μίγματος αέριου υδροχλωρίου σε ήλιο (5 % HCl σε He, $p = 100$ Torr). Το φάσμα αντιπροσωπεύει τη μέση τιμή, 100 διαδοχικών σαρώσεων και έχει καταγραφεί με διακριτική ικανότητα $R = 0.25$ cm^{-1} . Διακρίνονται οι κορυφές του H^{35}Cl , καθώς και αυτές του H^{37}Cl μετατοπισμένες σε μικρότερες τιμές συχνότητας (κυματαρίθμου) οι οποίες εμφανίζουν χαμηλότερη απορροφητικότητα που αντανακλά τη σχετική αφθονία των ισοτόπων του χλωρίου ($^{35}\text{Cl}:^{37}\text{Cl} = 3:1$).

Επεξεργασία δεδομένων, υπολογισμοί

Απαραίτητα στην παρούσα υποενότητα παρουσιάζεται, στοιχειοθετημένα με ένα παράδειγμα υπολογισμών, η όποια επεξεργασία πραγματοποιείται στα δεδομένα (αριθμητικές μετατροπές ή μετατροπές μονάδων και υπολογισμοί) ώστε να προκύψουν τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται. Γενικά δίδεται ένα αριθμητικό παράδειγμα από κάθε στάδιο υπολογισμού με σαφή αναφορά στη βασική ή τις βασικές σχέσεις, που χρησιμοποιούνται, όπως (αν) αυτές έχουν περιγραφεί στην ενότητα 1 ή 2. Εφόσον ζητηθεί παρουσιάζονται επιπλέον οι αποδείξεις των

σχετικών εξισώσεων που χρησιμοποιούνται στους υπολογισμούς ή παρατίθεται τεκμηριωμένη αναφορά στη βιβλιογραφία.

Στην παρούσα υποενότητα συμπεριλαμβάνονται επίσης, αριθμημένα τα διαγράμματα που κατασκευάστηκαν για την απεικόνιση των φαινομένων που μελετήθηκαν και των τιμών των ιδιοτήτων που μετρήθηκαν. Τα διαγράμματα εισάγονται περιγραφικά στο κείμενο με κατάλληλη παραπομπή (Διάγραμμα 2), αλλά όλα τα περιεχόμενα του διαγράμματος θα πρέπει να περιγράφονται συνοπτικά σε κατάλληλο υπότιτλο (λεζάντα) του διαγράμματος, ώστε ο αναγνώστης να αντιλαμβάνεται εύκολα τη συνολική εικόνα και πληροφορία των όσων απεικονίζονται, χωρίς να χρειάζεται να ανατρέξει στο κείμενο (stand-alone plot). Στους άξονες σημειώνονται τα αντίστοιχα μεγέθη και οι μονάδες τους. Η όποια περαιτέρω επεξήγηση περιγράφεται αναλυτικά εντός του κειμένου. Όπου απαιτείται υποδεικνύονται τα αντίστοιχα σφάλματα (βλ. π.χ. Διάγραμμα 2).



Διάγραμμα 2. Διάγραμμα Boltzmann για τον υπολογισμό της θερμοκρασίας πλάσματος. Χρησιμοποιούνται δεδομένα από τις φασματικές γραμμές εκπομπής πλάσματος σχηματιζόμενου κατά τη φωτοαποδόμηση με παλμικό λέιζερ δείγματος στερεού μολύβδου (Pb) και στοιχεία από την ιστοσελίδα ατομικών δεδομένων του NIST [4]. $\lambda_{LASER} = 1064 \text{ nm}$, $\tau_{LASER} = 10 \text{ ns}$.

Ανάλυση σφαλμάτων

Η ενότητα αυτή είναι από τις σημαντικότερες της εργαστηριακής αναφοράς καθώς μέσω της ανάλυσης των πειραματικών σφαλμάτων διαπιστώνεται και

τεκμηριώνεται η αξιοπιστία των μετρήσεων και των υπολογισμών. Ειδικότερα θα πρέπει να αναφέρεται και να αιτιολογείται η φύση των σφαλμάτων (τυχαία ή συστηματικά) και το όριο εμπιστοσύνης που εκφράζουν ενώ θα πρέπει να δίδονται οι υπολογισμοί διάδοσης του σφάλματος μέσω των διαφόρων υπολογισμών κατά την επεξεργασία των πρωτογενών δεδομένων.

Λεπτομερείς πληροφορίες παρουσιάζονται στο Κεφ. Ι του εγχειριδίου ασκήσεων Φυσικοχημείας [5] και σε σχετικά συγγράμματα [6, 7].

4. Ανάλυση-συζήτηση Αποτελεσμάτων – Ασκήσεις

Στο συγκεκριμένο τμήμα της αναφοράς σχολιάζονται τα αποτελέσματα και συγκρίνονται, είτε μεταξύ τους, είτε με αντίστοιχα της βιβλιογραφίας όσον αφορά την ακρίβεια ή/και τη φυσική τους σημασία και προτείνονται βελτιώσεις στην πειραματική διαδικασία. Επιθυμητή είναι η κατασκευή συνοπτικού πίνακα εφ' όσον υπάρχουν περισσότερα του ενός αποτελέσματα. Η παρουσίαση των αποτελεσμάτων ως προς τις αριθμητικές τους τιμές πρέπει απαραίτητα να γίνεται με τα σωστά σημαντικά ψηφία και να συμπεριλαμβάνεται το πειραματικό σφάλμα (το οποίο πρέπει να λαμβάνεται υπ' όψιν και κατά τη σύγκριση των αποτελεσμάτων). Επίσης πρέπει να παρατίθενται οι όποιες σχετικές με τα αποτελέσματα και την ερμηνεία τους, πειραματικές παρατηρήσεις, που θα βοηθήσουν τον αναγνώστη να εκτιμήσει την ποιότητα της δουλειάς των συγγραφέων.

Τέλος, στο τμήμα αυτό συμπεριλαμβάνονται οι ζητούμενες, για το εκάστοτε εργαστηριακό πείραμα, ασκήσεις, που μπορούν να τις βρουν όλα τα μέλη των ομάδων στο overview κάθε άσκησης, στην ιστοσελίδα του Εργαστηρίου στο e-class.

5. Συμπεράσματα

Στο τμήμα των συμπερασμάτων, οι συγγραφείς, παρουσιάζουν τα κύρια συμπεράσματα που εξήχθησαν από το πείραμά τους και βοηθούν τον αναγνώστη να εστιάσει στα σημαντικά ευρήματα της εργασίας τους.

6. Βιβλιογραφία

Η βιβλιογραφία αποτελεί ακριβή αναφορά στις πηγές στοιχείων που χρησιμοποιήθηκαν στη σύνταξη της εργαστηριακής αναφοράς. Δίδεται με ακρίβεια στο τέλος της αναφοράς, με την αντίστοιχη παραπομπή εντός του κειμένου και βοηθάει τον αναγνώστη να αντιστοιχίσει την όποια δήλωση των συγγραφέων εντός του κειμένου, με το επιστημονικό βιβλίο (textbook), ηλεκτρονικό σύνδεσμο, επιστημονικό εγχειρίδιο ή επιστημονική δημοσίευση που χρησιμοποιήθηκαν. Προσοχή η βιβλιογραφία έχει συγκεκριμένο και ακριβή τρόπο γραφής για βιβλία, άρθρα σε επιστημονικά περιοδικά και ιστοσελίδες (αναφέρονται οι συγγραφείς, ο τίτλος περιοδικού ή βιβλίου, ο εκδοτικός οίκος όταν πρόκειται για βιβλίο, ο τόμος, η σελίδα και το έτος δημοσίευσης, ο σύνδεσμος σε ιστοσελίδα) και πρέπει να δίνεται πάντα με παραπομπή (αριθμητική κατά προτίμηση, π.χ. [3,4]) εντός του κειμένου.

1. G. D. Peckham and McNaught, I. J., Applications of Maxwell-Boltzmann distribution diagrams *J. Chem. Educ.*, **1992**, *69*, 554.
2. K. Gaier, A. Angerhofer and H.C. Wolf, The lowest excited electronic singlet states of all-trans β -carotene single crystals, *Chem. Phys. Lett.* **187**, 103-109 (1991).
3. T. Buckup, T. Lebold, A. Weigel, W. Wohlleben, M. Motzkus, Singlet versus triplet dynamics of β -carotene studied by quantum control spectroscopy, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* **180** 314–321 (2006).
4. URL: http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html
5. Θ. Κιτσόπουλος, Α. Ρίζος, Ν. Στρατηγάκης, «Εργαστηριακές Ασκήσεις Φυσικοχημείας», Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας, Ηράκλειο 2008.
6. D.P. Schoemaker, C.W. Garland, J.W. Nibler “Experiments in Physical Chemistry”, Mc Graw Hill, New York, 2009
7. R. N. Zare, Spencer, B. H., Springer, D. S. and Jacobson, M. P., *Laser Experiment for Beginners*, University Science Books, Sausalito, California: **1995**

7. Συνεισφορά Μελών Ομάδας

Στο τμήμα αυτό της αναφοράς αναφέρεται αναλυτικά η συνεισφορά των μελών της ομάδας περιγράφοντας αναλυτικά τα τμήματα της αναφοράς που συνεισέφερε κάθε μέλος (επί τοις εκατό (%) συνεισφορά).

Παραρτήματα

Η αναφορά μπορεί να περιέχει παραρτήματα (στο τέλος της αναφοράς), στα οποία οι συγγραφείς μπορούν να συμπεριλάβουν πίνακες, δεδομένα ή διαγράμματα, που η συνδρομή τους μπορεί να δράσει επικουρικά στην κατανόηση ή την επεξήγηση φαινομένων ή ενδέχεται να αφορούν στο ενδιαφέρον μίας πιο ειδικευμένης επιστημονικής κοινότητας, αλλά δεν αξιολογούνται απαραίτητα, ώστε να συμπεριληφθούν στο κύριο σώμα της αναφοράς.