

Noter til

Kemi B

Jonas Niemann



GYMNASIEKEMI

Indhold

Mængdeberegning	3
Redoxreaktioner	4
Spændingsrækken.....	4
Oxidationstal.....	5
Redoxafstemning.....	5
Ligevægte	6
Le Chateliers princip.....	6
Forskellige ligevægtskonstanter.....	7
Syre-basekemi.....	8
pH og pOH.....	8
Syrestyrkekonstant og basestyrkekonstant	9
Stærk syre eller base	9
Ikke-stærk syre eller base.....	10
Pufferligningen	10
Amfolytligningen.....	10
Organisk kemi	11
Reaktionstyper	11
Funktionelle grupper og navngivning.....	15
Fotokemi	19
Interaktion mellem stof og lys.....	20
Lambert-Beers lov.....	23
Polarisering af lys.....	23
Biokemi	24
Triglycerider	24
Kulhydrater	26
Proteiner.....	28
Reaktionskinetik.....	30
Elementarreaktioner.....	30
Reaktionsmekanisme	30
Energiprofil.....	30
Påvirkning af reaktionshastighed	31
Hastighedsudtryk	32

Mængdeberegning

Navn	Forkortelse	Enhed
Masse	m	gram - g
Stofmængde	n	mol - mol
Volumen	V	liter - L
Tryk	p	atm bar
Temperatur	T	Celsius - °C Kelvin - K
Koncentration	c	$\frac{\text{mol}}{\text{liter}}$ - molær - $\frac{\text{mol}}{\text{L}}$ - M
Molarmasse	M	$\frac{\text{gram}}{\text{mol}}$ - $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$
Massefylde - densitet	ρ - rho (græsk bogstav)	$\frac{\text{gram}}{\text{liter}}$ - $\frac{\text{g}}{\text{L}}$

Stofmængdeformler

$$n = \frac{m}{M}$$

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

$$\rho = \frac{m}{V}$$

Idealgasligningen

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

R er gaskonstanten.

$$R = 8,206 \cdot 10^{-2} \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{K} \cdot \text{mol}} = 8,314 \cdot 10^{-2} \frac{\text{L} \cdot \text{bar}}{\text{K} \cdot \text{mol}}$$

Temperaturomregning

$$T[\text{K}] = T[^\circ\text{C}] + 273,15$$

Redoxreaktioner

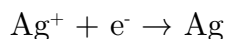
Oxidation

I en oxidation af et grundstof afgives elektroner og oxidationstallet stiger. Eksempelvis med tin:



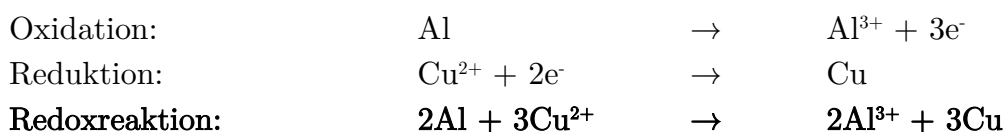
Reduktion

I en reduktion af et grundstof optages elektroner og oxidationstallet falder. Eksempelvis med sølv(I):



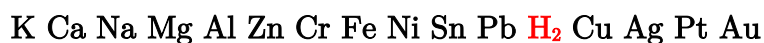
Redoxreaktion

I en redoxreaktion skal der både oxideres og reduceres et grundstof. Antallet af elektroner der flyttes skal passe, så der ikke er nogle frie elektroner. Eksempelvis reaktionen mellem kobber(II) og aluminium:

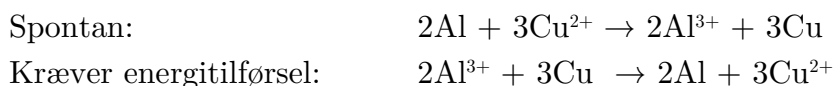


Spændingsrækken

Spændingsrækken oplister de neutrale metaller (og H_2) efter hvor reaktionsvillige de er. Længst til venstre er de reaktionsvillig uædle metaller, som gerne vil oxideres. Længst til højre er de ædle metaller.



Spændingsrækken kan bruges til at afgøre om reaktioner er spontane eller kræver energitilførsel. De er spontane hvis det mest ædle metal dannes på sin neutrale form og det mest reaktionsvillige dannes som ion.



Bemærk metaller til venstre for H_2 kan opløses i syre, da de oxideres af H^{+} .

Oxidationstal

Oxidationstallet for et grundstof kan typisk udregnes ud fra følgende regler, og skrives med romertal:

- Oxidationstallet af alle atomer i en forbindelse skal til samme give forbindelsens ladning.
- H har oxidationstallet +I¹
- O har oxidationstallet -II¹

Eksempelvis for nitrogen i NO₃⁻

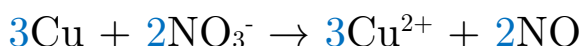
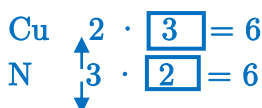
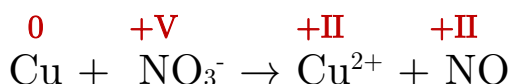
$$\begin{aligned} \text{N} + \text{O} \cdot 3 &= -1 \\ \text{N} + (-2) \cdot 3 &= -1 \\ \text{N} + (-6) &= -1 \\ \text{N} = 5 &= +\text{V} \end{aligned}$$

Redoxafstemning

Når man redoxafstemmer følger man denne procedure:

1. Angiv grundstoffernes oxidationstal.
2. Afstem oxidation og reduktion (opgang og nedgang i oxidationstal).
3. Optæl ladning og afstem med H⁺ (sur), OH⁻ (basisk) eller H⁺/OH⁻ på højre side (neutral).
4. Optæl H og O og afstem med H₂O.

Eksempel med ikke afstemt redoxreaktion i sur opløsning, Cu + NO₃⁻ → Cu²⁺ + NO

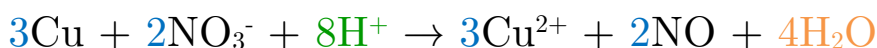


Ladning

Venstre	Højre
2 · (-1) = -2	3 · (+2) = +6
<div style="border: 1px solid green; padding: 2px;">+8H⁺</div>	



	Venstre	Højre
O	2 · 3 = 6	2
H	2 · 1 + 6 · 1 = 8	0
	<div style="border: 1px solid orange; padding: 2px;">+4H₂O</div>	

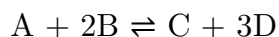


¹ Den mere præcise regel er at H er +I så længe det er bundet til noget mere elektronegativt, og O er -II så længe det er bundet til noget mindre elektronegativt. For begge grundstoffer er det dog ofte tilfældet.

Ligevægte

Reaktionsbrøk, Y

For en reaktion



kan man opskrive en reaktionsbrøk, Y

$$Y = \frac{[C] \cdot [D]^3}{[A] \cdot [B]^2}$$

Rene stoffer (faste stoffer og flydende stoffer, som ikke er opløsningsmidler) indgår ikke i reaktionsbrøken.

Ligevægtskonstant, K

Når reaktionen er i ligevægt er reaktionsbrøken lig med ligevægtskonstanten, K,

$$Y = K$$

Ligevægtskonstanten er unik for reaktionen, men temperaturafhængig.

Le Chateliers princip

Hvis en reaktion ikke er i ligevægt er

$$Y \neq K$$

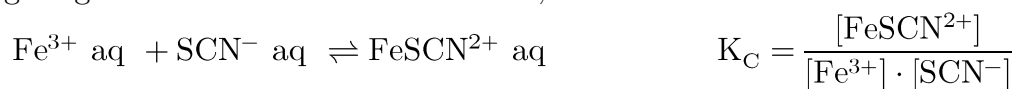
Hvis $K < Y$ vil reaktionen primært forløbe mod venstre, indtil der er ligevægt.

Hvis $K > Y$ vil reaktionen primært forløbe mod højre, indtil der er ligevægt.

Le Chateliers princip siger at hvis man laver et indgreb i en reaktion, der er i ligevægt, vil reaktionen modvirke indgrebet for at komme tilbage til ligevægt.

Forskellige ligevægtskonstanter

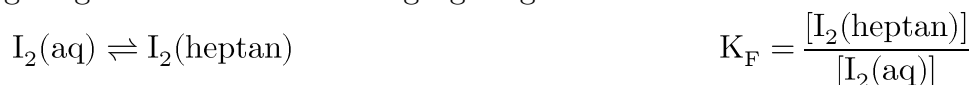
K_C Ligevægtskonstant med koncentrationer, den mest normale.



K_O Opløselighedsprodukt. Gælder for opløselighedsreaktioner.



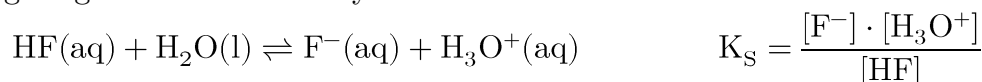
K_F Ligevægtskonstant for fordelingsligevægt.



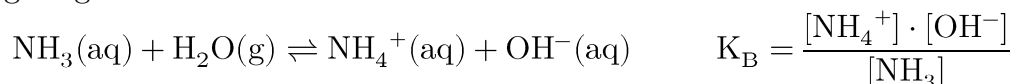
K_P Ligevægtskonstant med partialtryk.



K_S Ligevægtskonstant for en syres reaktion med vand.



K_B Ligevægtskonstant for en bases reaktion med vand.



Reaktionsbrøkers enhed

Enheden for en reaktionsbrøk (og ligevægtskonstant) findes ved at skrive passende enheder i brøken. Eksempelvis:

$$K_C = \frac{[\text{FeSCN}^{2+}]}{[\text{Fe}^{3+}] \cdot [\text{SCN}^{-}]}$$

$$K_O = [\text{Fe}^{3+}] \cdot [\text{Cl}^{-}]^3$$

$$K_P = \frac{p(\text{NH}_3)^2}{p(\text{N}_2) \cdot p(\text{H}_2)^3}$$

$$\frac{\text{M}}{\text{M} \cdot \text{M}} = \text{M}^{-1}$$

$$\text{M} \cdot \text{M}^3 = \text{M}^4$$

$$\frac{\text{bar}^2}{\text{bar} \cdot \text{bar}^3} = \text{bar}^{-2}$$

Syre-basekemi

Symboler

H_3O^+	Oxonium-ioner	OH^-	Hydroxid-ioner
c_X	Formel koncentration af X (M)	$[\text{X}]$	Aktuel koncentration af X (M)
K_S	Syrestyrkekonstant (M)	K_B	Basestyrkekonstant (M)
K_V	Vands ionprodukt (M^2)	n_X	Stofmængde af X (mol)

pH og pOH

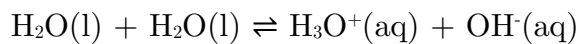
pH og pOH er defineret på følgende måde.

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] \qquad [\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-\text{pH}}$$

$$\text{pOH} = -\log [\text{OH}^-] \qquad [\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}}$$

Vands selvionisering

Vands selvionisering er vands syre-base-reaktion med sig selv:



Reaktionens ligevægtskonstant kaldes **vands ionprodukt, K_V**

$$K_V = [\text{OH}^-] \cdot [\text{H}_3\text{O}^+]$$

$$\text{p}K_V = \text{pOH} + \text{pH}$$

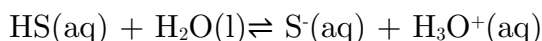
Ved 25°C er

$$K_V = 10^{-14} \text{M}^2 \quad \text{og} \quad \text{p}K_V = 14$$

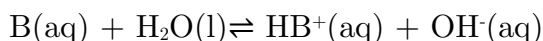
Syrestyrkekonstant og basestyrkekonstant

Når en syre eller en base reagerer med vand, kan man opskrive deres reaktioner generelt på denne måde (ladningen på syren og basen kan godt være anderledes):

Syres reaktion med vand



Bases reaktion med vand



Når syren reagerer med vand, omdannes den til sin korresponderende base og vice versa for basen.

Disse to reaktioners ligevægtskonstanter kaldes **syrestyrkekonstanten** K_S og **basestyrkekonstanten** K_B .

$$K_S = \frac{[\text{S}^-] \cdot [\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{HS}]}$$

$$K_B = \frac{[\text{HB}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{B}]}$$

$$\text{p}K_S = -\log K_S$$

$$\text{p}K_B = -\log (K_B)$$

$$K_S = 10^{-\text{p}K_S}$$

$$K_B = 10^{-\text{p}K_B}$$

Korresponderende syre-basepar

For et korresponderende syre-base-par gælder følgende ved 25°C:

$$\text{p}K_S + \text{p}K_B = 14$$

$$K_S \cdot K_B = 10^{-14} \text{M}^2$$

Dvs. at jo stærkere en syre et stof er, jo svagere en base er stoffets korresponderende base.

Stærk syre eller base - $\text{p}K_S/\text{p}K_B$ mindre end 0

I opløsninger af stærke syrer/baser omdannes næsten alle syre/basemolekyler til deres korresponderende base/syre og $\text{H}_3\text{O}^+/\text{OH}^-$.

Stærk syre: $[\text{H}_3\text{O}^+] \approx c_S$

Stærk base: $[\text{OH}^-] \approx c_B$

Derfor kan pH/pOH udregnes ved:

Syre: $\text{pH} = -\log (c_S)$

Base: $\text{pOH} = -\log (c_B)$

Ikke-stærk syre eller base - pK_S/pK_B større end 0

I opløsninger af ikke-stærke syrer/baser er man nødt til at tage højde for ligevægten hvor ikke alle syre/basemolekyler omdannes til deres korresponderende base/syre og H_3O^+/OH^- . $[H_3O^+]$ eller $[OH^-]$ kan findes ved at løse følgende ligninger.

$$K_S = \frac{[H_3O^+]^2}{c(S) - [H_3O^+]}$$

$$K_B = \frac{[OH^-]^2}{c(B) - [OH^-]}$$

Derefter kan pH eller pOH udregnes:

$$pH = -\log([H_3O^+])$$

$$pOH = -\log([OH^-])$$

Pufferligningen

Formlen for pH kan omskrives til pufferligningen

$$pH = pK_S + \log\left(\frac{[B]}{[S]}\right) \quad \text{eller} \quad pH = pK_S + \log\left(\frac{n_B}{n_S}\right)$$

I opløsning af et korresponderende syre-base-par der begge ikke er stærke, kaldet **puffersystemer**, kan man antage at $c_S \approx [S]$ og $c_B \approx [B]$. Pufferligningen bliver der

$$pH = pK_S + \log\left(\frac{c_B}{c_S}\right)$$

Jo stærkere syren eller basen er, jo dårligere bliver denne antagelse.

Amfolytligningen

For en opløsning af en amfolyt, der både er en svag syre og svag base kan følgende formel bruges til at udregne pH. Dette kan eksempelvis være i ækvivalenspunkter hvor der er dannet en amfolyt. Formlen kan ikke bruges hvis der er tilsat anden syre eller base.

$pK_{S-Amfolyt}$ betegner amfolyttens pK_S og pK_{S-Syre} betegner den korresponderende syres pK_S .

$$pH = \frac{(pK_{S-Syre} + pK_{S-Amfolyt})}{2}$$

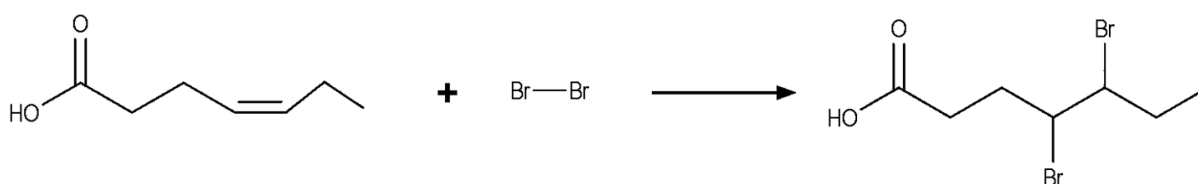
Organisk kemi

Additionsreaktioner

Additionsreaktioner er vigtige for alkener og alkyner.

En additionsreaktion er en reaktion hvor et mindre molekyle (typisk F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 eller H_2O) tilføjes til et større ved at bryde en dobbelt- eller tripelbinding. Addition er det modsatte af elimination.

Et konkret eksempel er hept-4-ensyres reaktion med Br_2 .

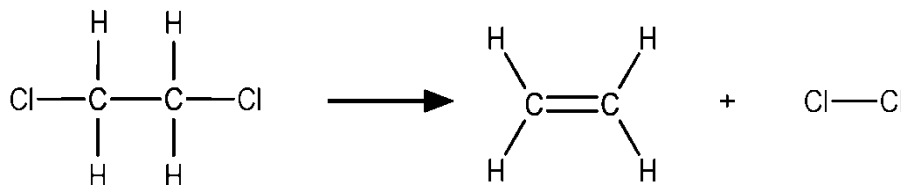


Eliminationsreaktioner

Eliminationsreaktioner er vigtige for alkaner og alkoholer.

En eliminationsreaktion er en reaktion hvor et mindre molekyle fraspaltes fra et større molekyle under dannelsen af en dobbelt - eller tripelbinding. Elimination er det modsatte af addition.

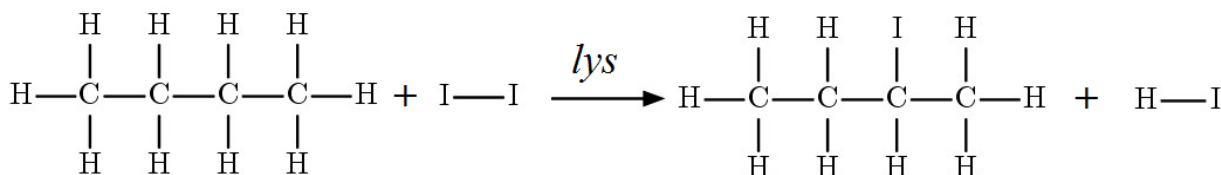
Et konkret eksempel er eliminationen af 1,2-dichlorethan.



Substitutionsreaktioner

Substitution er vigtige for alkaner og benzenderivater.

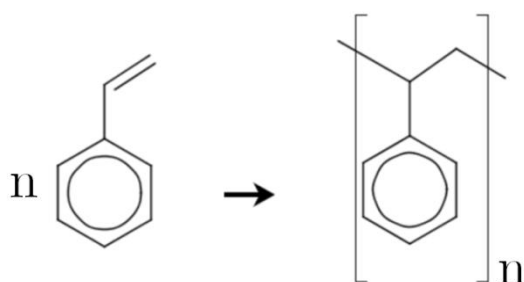
I en substitutionsreaktion bytter to atomgrupper plads med hinanden. Et eksempel er butans reaktion med diiod. Bemærk at substitutionsreaktioner tit kræver energi i form af lys for at virke.



Polymerisationsreaktioner

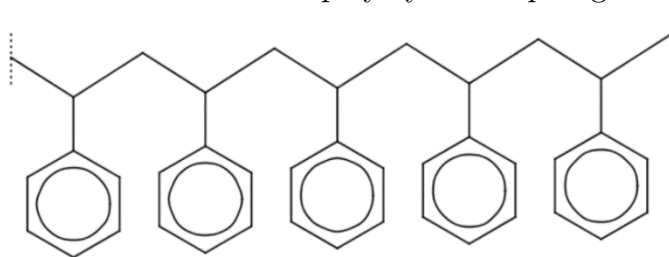
Polymerisationsreaktioner er vigtige for alkener.

En polymer dannes ved en monomer laver en kædereaktion med sig. Eksempelvis phenylethen (styren) som danner polyphenylethen (polystyren), som er det flamingo er lavet af.



Monomeren og den normale måde at tegne polymeren på.

Polymere kan i princippet forsætte i uendeligt lange kæder og kan også afgrenes vilkårligt, hvorfor de tegnes som ovenfor. Et udsnit af polystyren ses på figuren nedenfor.

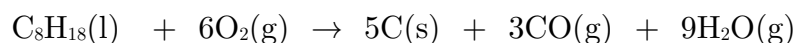
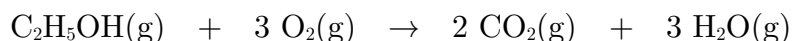


Forbrændingsreaktioner

Forbrændinger er vigtige for alkaner og alkoholer.

I en forbrændingsreaktion oxideres carbon fra organisk stof af O_2 . Forbrændingsreaktioner er dermed redoxreaktioner. Er forbrændingen fuldstændig dannes der CO_2 og H_2O . Er forbrændingen ufuldstændig dannes der en blanding af $C(sod)$, CO og CO_2 .

Eksempelvis ses her en fuldstændig forbrænding af ethanol og en ufuldstændig forbrænding af 2,2,4-trimethylpentan, som begge er brændstoffer der bruges til biler.

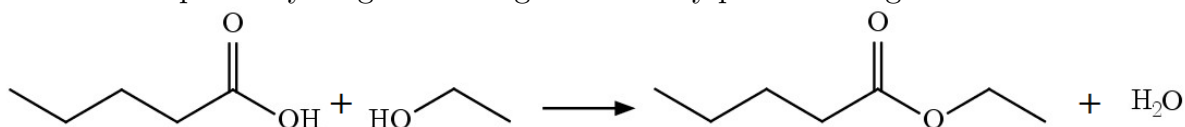


Bemærk at ufuldstændige forbrændinger kan afstemmes på flere måder.

Kondensationsreaktioner

Kondensationsreaktioner er vigtige for alkoholer, carboxylsyrer og aminer.

I en kondensationsreaktion sammenslås to molekyler under fraspaltning af et mindre molekyle, typisk vand. Kondensation er det modsatte af hydrolyse. Eksempelvis kondenserer pentansyre og ethanol og danner ethylpentanoat og vand.



Forskellige reaktanter danner ved kondensation forskellige produkter. Nogle vises nedenfor.

Reaktanter

To alkoholer
En alkohol og en carboxylsyre
En amin og en carboxylsyre
To carboxylsyrer

Produkt

Ether
Ester
Amid
Anhydrid

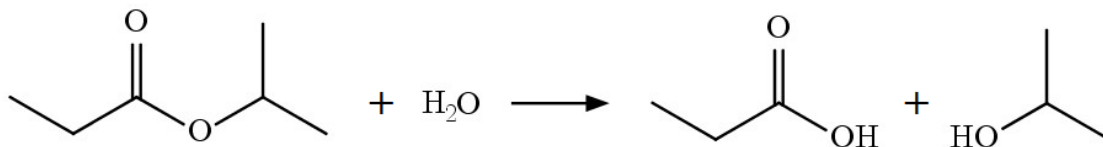
Esterfikationer

Esterfikation er et andet navn for kondensation der danner estere.

Hydrolysereaktioner

Hydrolyse er vigtigt for estere, ethere og amider.

Hydrolysereaktioner er reaktioner hvor et mindre molekyle, typisk vand, reagere med et større molekyle og splitter det. Hydrolyse er det modsatte af kondensation. Eksempelvis kan prop-2-ylpropanoat hydrolyseseres af vand til propansyre og propan-2-ol.



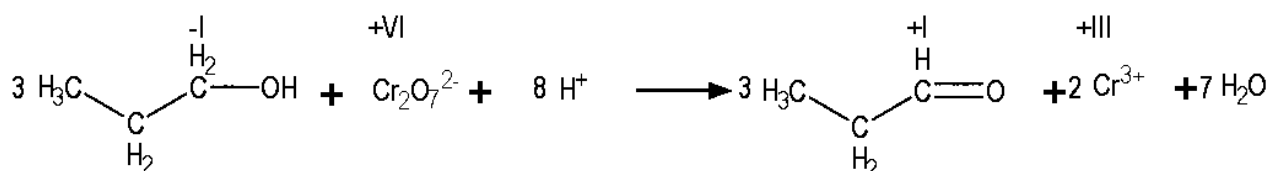
Redoxreaktioner i organisk kemi

Redoxreaktioner er i organisk kemi vigtigt for alkoholer, aldehyder, ketoner og carboxylsyrer.

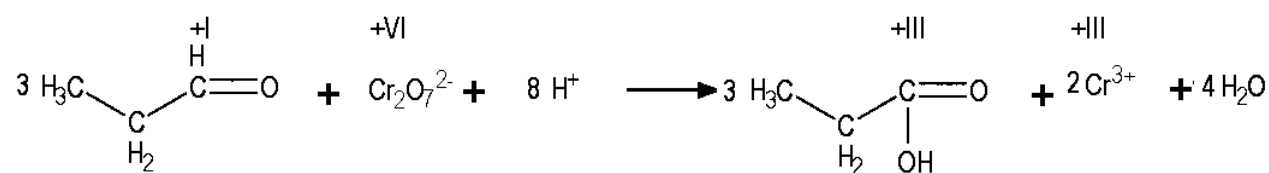
Alkoholer kan oxideres. Alt afhængige af om alkoholen er primær sekundær eller tertiær dannes der forskellige produkter.

Ved bestemmelse af oxidationstallet for C kan man se bort fra de dele af molekylet der ikke forandres.

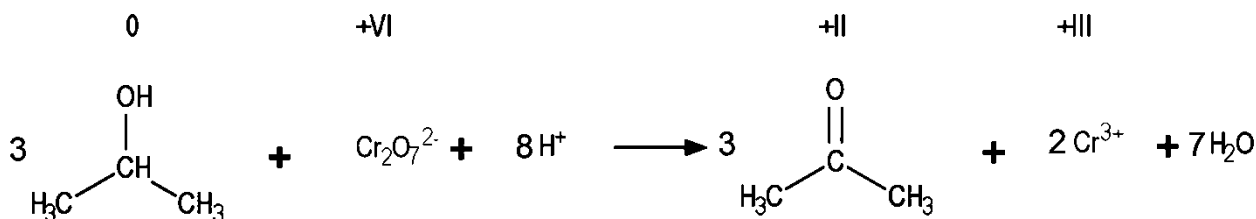
Primære alkoholer kan oxideres til aldehyder, eksempelvis oxidationen af propan-1-ol til propanal.



Aldehyder kan oxideres videre til carboxylsyrer, eksempelvis oxidationen af propanal til propansyre



Sekundære alkoholer kan oxideres til ketoner, eksempelvis oxidationen af propan-2-ol til propanon.



Tertiære alkoholer kan kun oxideres ved forbrændingsreaktioner hvor carbonkæden ødelægges.

Funktionelle grupper og navngivning

På næste side er en liste over funktionelle grupper i organisk kemi som typisk er brugbar for kemi på B-niveau. De vigtigste er markeret med **fed**.

Organiske stoffer skal navngives sådan af den funktionelle gruppe højest på følgende liste navngives med suffiks og alle andre funktionelle grupper med præfiks, hvor de opskrives alfabetisk.

Bemærk at suffikset for alkener og alkyner kan bruges sammen med andre suffiks eksempelvis i

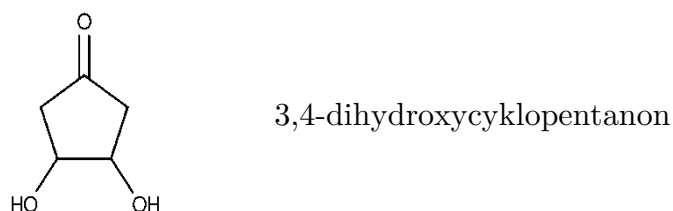
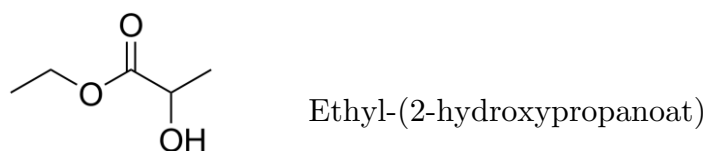
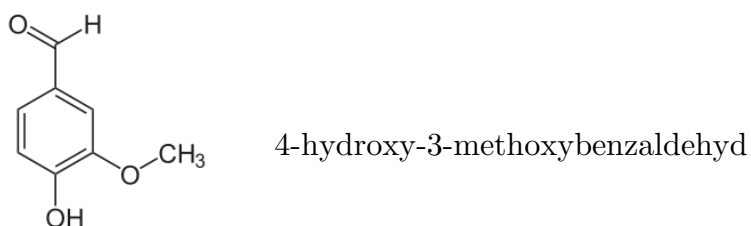


Når der står skrift i *kursiv*, betyder det man skriver navnet på det specifikke alkan eller halogen der sidder på forbindelsen. Eksempelvis:

Syrehalogenider med chlor har suffiks *-oylchlorid*

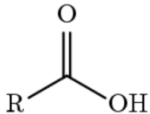
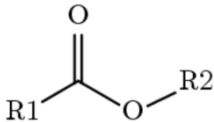
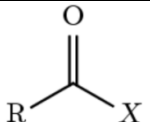
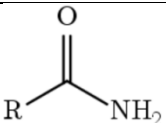
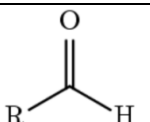
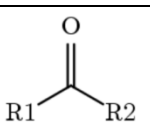
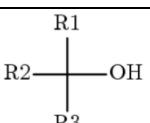
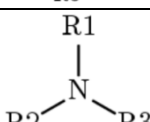
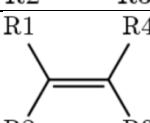
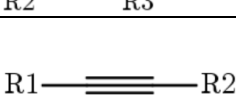
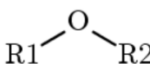
Ethere af butan har præfikset *butoxy-*

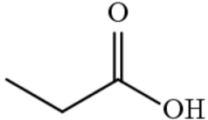
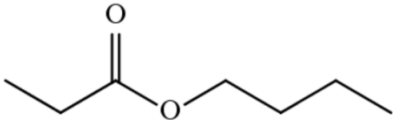
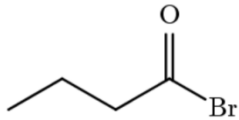
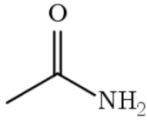
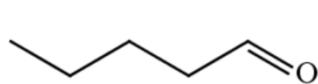
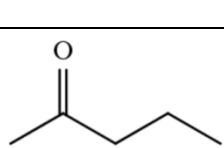
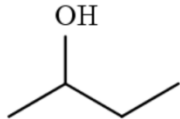
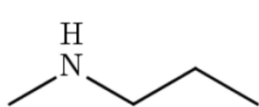
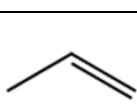
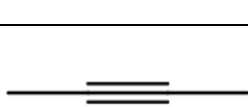
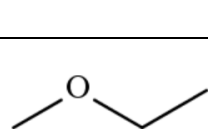
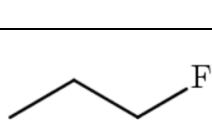
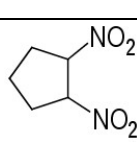
Eksempler på organiske stoffer med flere funktionelle grupper



Symboler

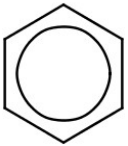
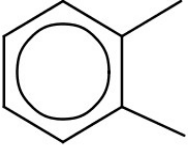
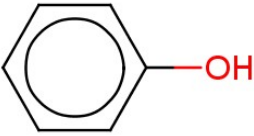
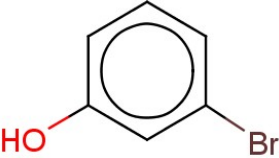
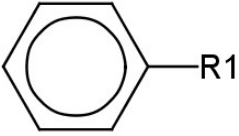
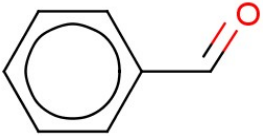
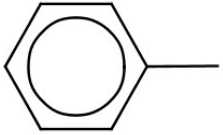
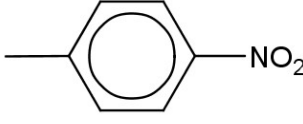
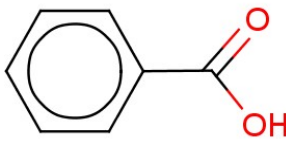
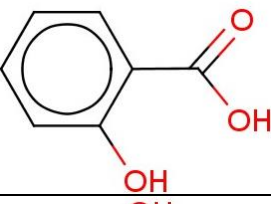
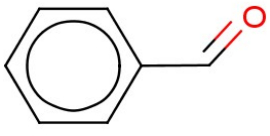
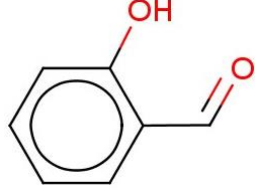
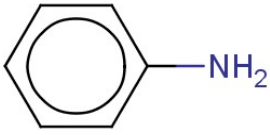
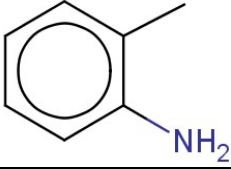
R, R1, R2... eller H.X	En radikalgruppe af carbonhydrider med vilkårlige funktionelle grupper Halogen (atom fra gruppe 17)
---------------------------	--

Stofklasse	Struktur	Præfiks	Suffiks
Carboxylsyre		Carboxy- (inkl. C-atomet)	-syre
Ester		(R2)Alkoxocarbonyl- (inkl. C-atomet)	-oat
Syrehalogenid		Halogencarbonyl- (inkl. C-atomet)	-oylhalogenid
Amid		Caboxamido- (inkl. C-atomet)	-amid
Aldehyd		Oxo-	-al
Keton		Oxo-	-on
Alkohol		Hydroxy-	-ol
Amin		Amino-	-amin
Alken		Alkenyl-	-en*
Alkyn		Alkynyl-	-yn*
Ether		Alkoxy-	(Alkylalkylether)
Halogenforbindelse	$R-X$	Halogen-	-
Nitroforbindelse	$R-NO_2$	Nitro-	-

Eksempler på navngivning		
Carboxylsyre		Propansyre
Ester		Butyl(propanoat)
Syrehalogenid		Butanoylbromid
Amid		Ethanamid
Aldehyd		Pentanal
Keton		Pentan-2-on
Alkohol		Butan-2-ol
Amin		Methylpropylamin
Alken		Propen
Alkyn		But-2-yn
Ether		Methoxyethan
Halogenforbindelse		1-fluorpropan
Nitroforbindelse		1,2-dinitrocyklopentan

Benzenderivater

Benzen og de afledte stoffer af benzen har særlige systematiske og usystematiske navne. Bemærk at nogle stoffer kan have flere accepterede navne.

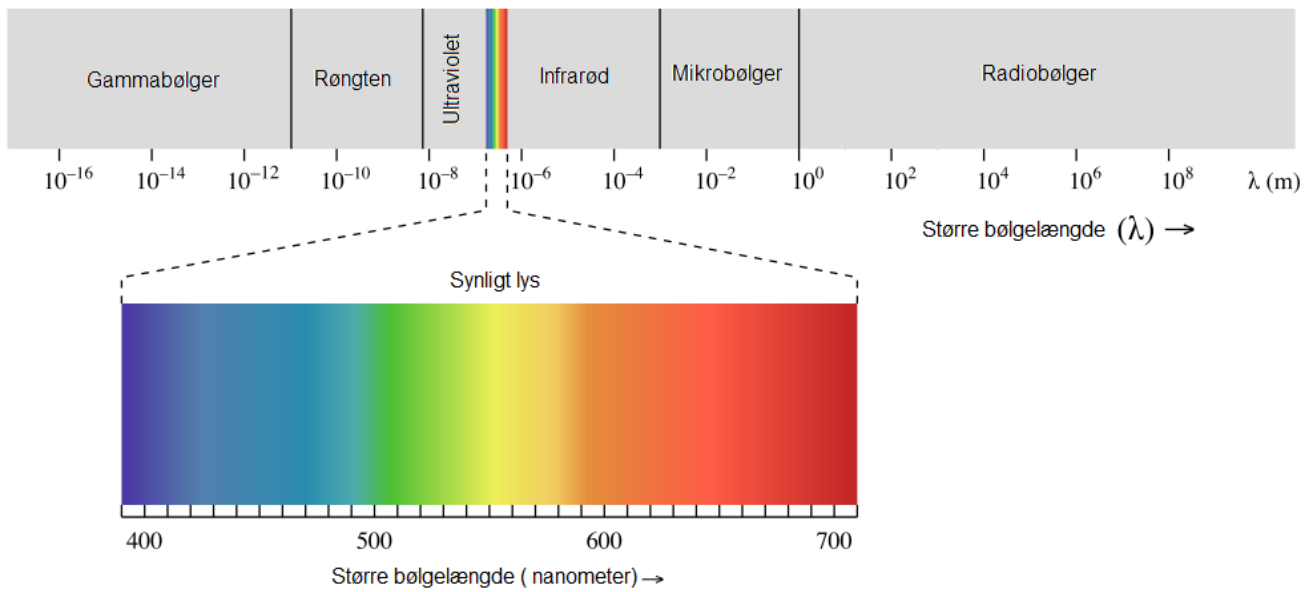
Grundform	Navn på grundform	Eksempel på afledt stof	Navn på afledt stof
	Benzen		1,2-dimethylbenzen
	Phenol		3-bromphenol
	Phenyl (sidekæde)		Phenylmethanal
	Toluen		4-nitrotoluen
	Benzoesyre		2-hydroxybenzoesyre
	Benzaldehyd		2-hydroxybenzaldehyd
	Anilin		2-methylanilin

Fotokemi

Lys

Lys er fællesbetegnelse for **elektromagnetisk ståling** og bølge-partiklerne for lys kaldes for **fotoner**. Lys er altså ikke stof da det ikke består af atomer.

Synligt lys er fotoner med en bølgelængde på 400nm-700nm (nanometer, 10^{-9}m).



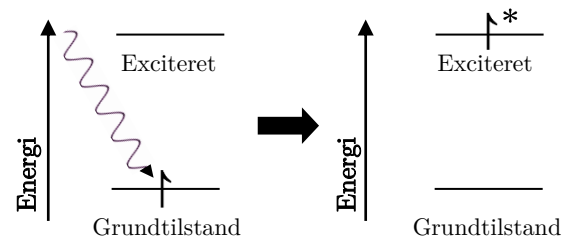
Figur 1: Det elektromagnetiske spektrumⁱ

Interaktion mellem stof og lys

Stof (atomer og molekyler) kan interagere med fotonerne fra lys i forskellige processer. De er:

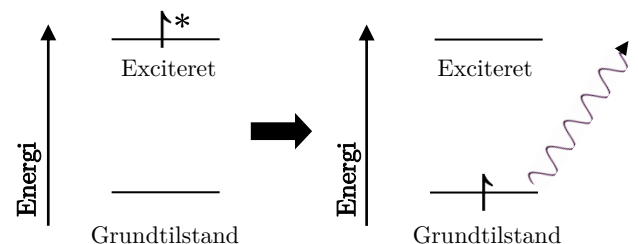
Absorption

En foton optages af stoffet. Fotonens energi overføres til en elektron som går fra **grundtilstanden** til en **exciteret tilstand**.



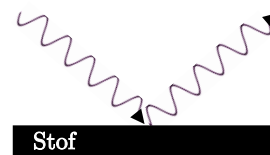
Emission

En foton udsendes af stoffet. En elektron falder fra en **exciteret tilstand** til **grundtilstanden**, og energiforskellen mellem tilstandene overføres til fotonen.



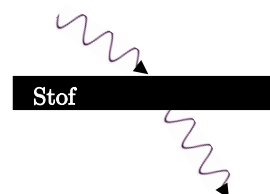
Refleksion

En foton rammer stof og absorberes ikke, men kastes tilbage. På en glat overflade kan man få **regulær refleksion** som giver spejling.



Transmission

En foton rammer stof, absorberes ikke, men passerer igennem stoffet, som i glas. Fotonen kan stadig påvirkes af fænomener som refraktion og polarisering.



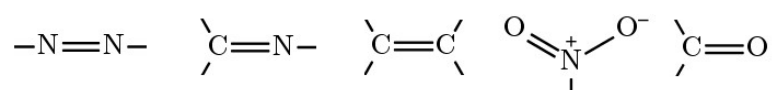
Ud over de 4 grundinteraktioner kan de også kombineres til specialtilfælde. Eksempelvis er **fluorescens** når absorption efterfølges straks af emission, og **phosphorescens** når absorption efterfølges langsomt af emission.

Farvedannelse

Stoffer er farvede hvis energiforskellen mellem en exciteret tilstand og grundtilstanden i stoffet svarer til energien for fotoner i det synlige område af det elektromagnetiske spektrum, ~400nm-700nm (~170kJ/mol-300kJ/mol).

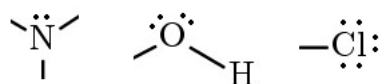
Dette opnås typisk ved at molekylet indeholder et **overgangsmetal** eller ved at det indeholder atom-grupper med elektroner i p-orbitaler der danner sammenhængende systemer af p-orbitaler. Dette kaldes **chromofore grupper** og **konjugerede systemer**.

De chromofore grupper varierer i styrke, hvor den svageste er C=C. Hvis det kunjugerede system udelukkende består af alkener, skal molekylet som tommelfingerregel have 8 dobbeltbindinger for at være farvet.

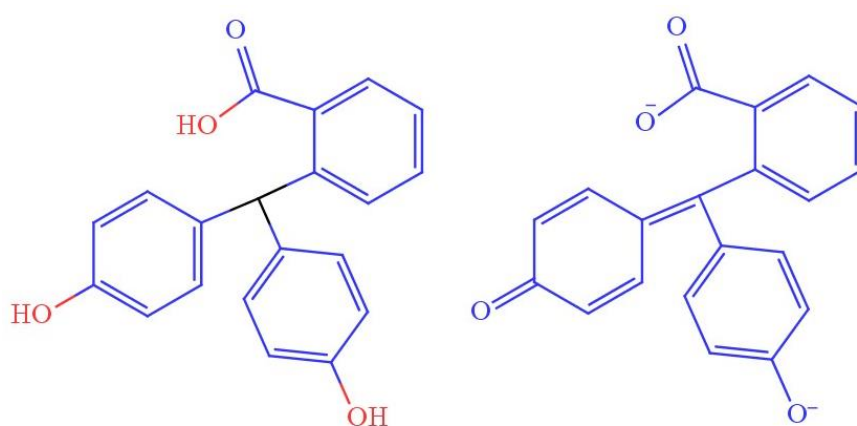


Figur 2: Nogle chromofore grupper.

Ud over chromofore grupper kan atom-grupper med frie elektronpar også ændre eller forstærke farver. Disse grupper kaldes **auxochrome**.

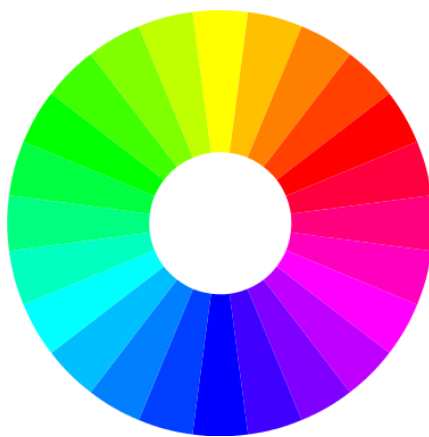


Figur 3: Nogle auxochrome grupper.

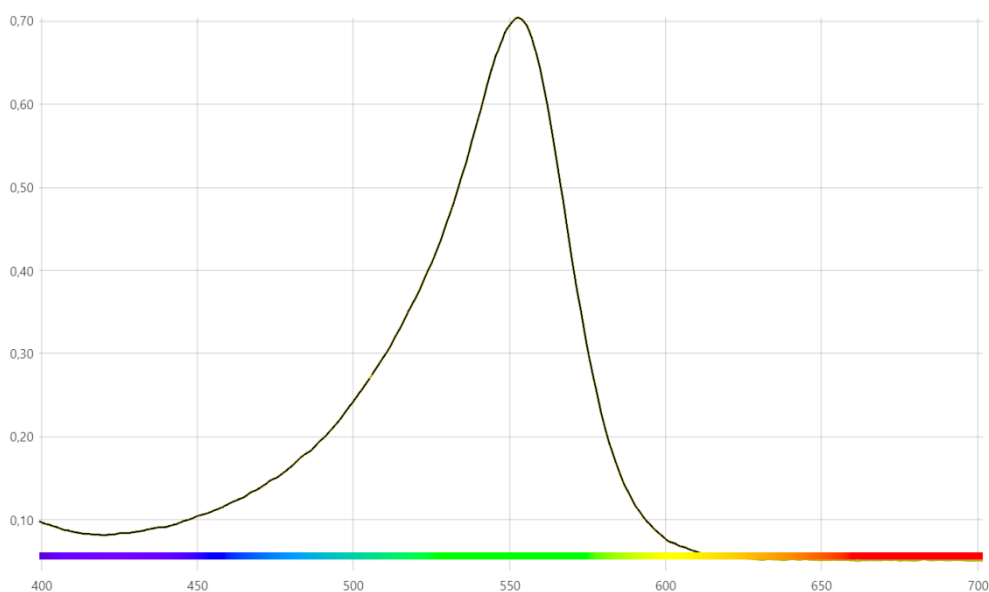


Figur 4: Phenolphthalein på syre-form (t.v.) og base-form (t.h.). Chromofore grupper er tegnet blå, auxochrome røde og de resterende sorte. Syre-formen er farveløs, hvilket stemmer med at den indeholder tre små konjugerede systemer (brudt af carbon-atomet i midten), og at base-formen er magenta, da den indeholder et konjugeret system med 24 p-orbitaler.

For at kunne afgøre hvilken farve et stof har, skal man se på dets **absorbtionsspektrum**, som viser hvor meget lys der absorberes af et stof, ved forskellige bølgelængder af lys. Et stofs farve vil være **komplementærfarven** (den modsatte på farvehjulet) til farven af lyset der absorberes.



Figur 5: Farvehjul.ⁱⁱ



Figur 6: Absorbtionsspektrum af phenolphthalein ved pH~9.
Phenolphthalein har en magenta farve, hvilket er den komplementære til limegrøn.

Lambert-Beers lov

Jo flere farvestof-molekyler lys skal passere igennem, jo mere lys absorberes. Denne sammenhæng beskrives i Lambert-Beers lov, så længe absorbansen er under 1:

$$A = \varepsilon_{\lambda} \cdot [\text{stof}] \cdot l$$

Hvor

A er absorbansen, et udtryk for hvor meget lys der absorberes.

ε_{λ} er ekstinktionskoefficienten ved en bestemt bølgelængde af lys, λ .

[stof] er den aktuelle koncentration af farvestoffet.

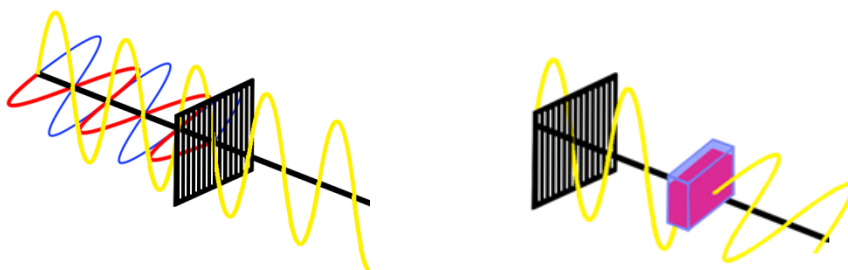
l er længden af den kuvette man måler gennem, typisk 1,00cm.

Når man bruger Lambert-Beers lov i spektrofotometri, skal man typisk bestemme ε_{λ} ved at lave lineær regression af målinger med kendte koncentrationer.

Polarisering af lys

Fotoner har ud over en karakteristisk bølgelængde også et plan lysbølgen svinger i. Normalt lys består af fotoner der svinger i alle mulige plan, kaldet **upolariseret lys**.

Polariseret lys er sorteret så alle fotoner svinger i samme plan.



Figur 7: Til venstre: Upolariseret lys der polariseres.
Til højre: Polariseret lys der roteres af en opløsning af chirale molekyler.

Hvis man lyser polariseret lys på chirale molekyler kan de rotere planet et bestemt antal grader. Dette beskrives følgende sammenhæng

$$\alpha = [\alpha]_{\lambda}^T \cdot [\text{stof}] \cdot l$$

Hvor

α er drejningen af lys i grader.

$[\alpha]_{\lambda}^T$ er drejningskonstanten for stoffet ved en bestemt temperatur og bølgelængde af lys.

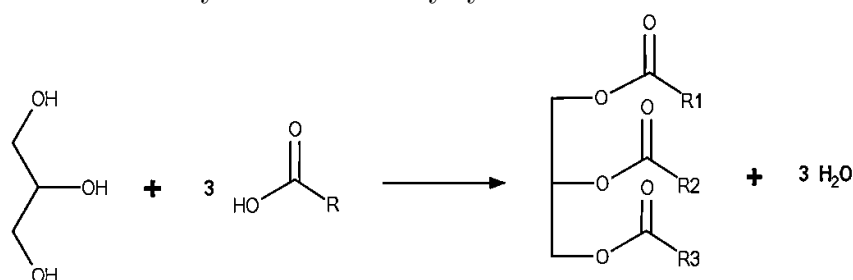
[stof] er den "koncentration" af stoffet, typisk i g/mL.

l er længden af den kuvette man måler gennem, typisk 1,00dm.

Biokemi

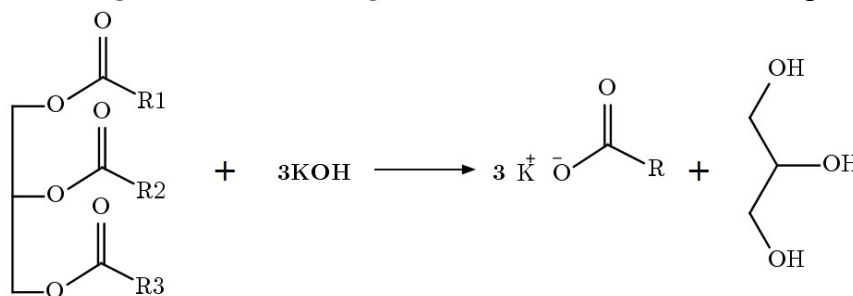
Triglycerider

Triglycerider dannes ved at **kondensere propan-1,2,3-triol** med tre **fedtsyrer**, som ikke nødvendigvis er ens. En fedtsyre er en carboxylsyre med mere end 4 carbon-atomer.



Figur 8: Dannelse af et triglycerid ved kondensationsreaktion.

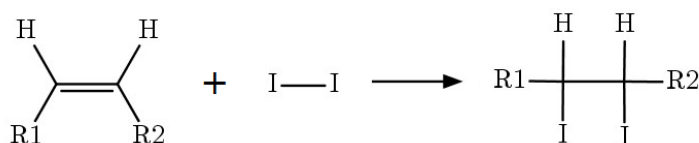
Triglycerider kan **hydrolyseres**. Bruges vand til at hydrolysere får man den modsatte reaktion af figur 8. Bruger KOH eller NaOH **forsæber** man fedtet. Et mål for hvor mange mg KOH man skal bruge til at forsæbe 1g fedt kaldes stoffets **forsæbningstal**.



Figur 9: Basisk hydrolysereaktion af triglycerid, også kaldet forsæbning. Ionforbindelsen mellem kalium og carboxylsyreresten er sæbe.

Umættethed

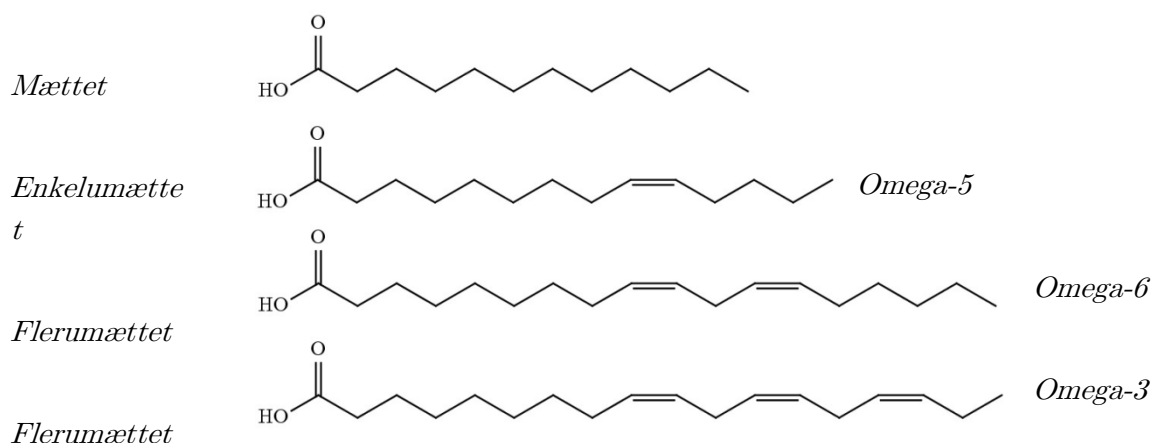
Jo flere dobbeltbindinger et triglycerid indeholder, jo mere umættet siges det at være. Et kvantitativt mål for umættethed er fedtstoffets **iodtal** der viser hvor mange gram I_2 der kan **adderes** til 100g fedt.



Figur 10: Additionsreaktion af dobbeltbinding med diiod.

Enkelte fedtsyrer kan kategoriseres som mættede, enkeltumættede eller flerumættede alt efter hvor mange dobbeltbindinger de indeholder.

Biokemisk vigtige molekyler som mennesker ikke kan danne ud fra andre stoffer kaldes **essentielle**, og blandt fedtsyrerne er der kun linolsyre og linolensyre (de to nederste i figur 11).



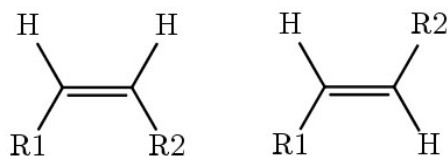
Figur 11: Forskellige fedtsyrer.

Omegafedtsyrer

Placeringen af dobbeltbindinger angives i fedtsyrer normalt efter hvor de sidder i forhold til enden af kæden, hvor de er biokemisk vigtige, frem for starten (carboxylsyre-enden). Dette navngives **omega**, som i figur 11.

Cis- og transfedtsyrer

Umættet fedt kan forekomme på **cis-form** og **trans-form**. På cis-form vender den samme atomgruppe (i fedtsyrer H) samme vej på hver sin side af dobbeltbindingen, og modsat på trans-formen. Trans-fedt er naturligt meget sjældent og indtag af det forbundet med hjertekarsygdom bl. a.



Figur 12: Cis-form(tv) og trans-form (th).

Kulhydrater

Stoffer der general kan skrives som $C_x(H_2O)_x$ kaldes for **kulhydrater**, **carbohydrater** eller **sakkarider** og er hovedbestanddelen i sukkerstoffer.

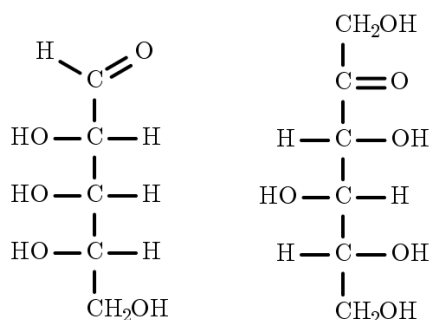
Monosakkarider

De mindste kulhydrater består af polyalkoholer og kaldes **monosakkarider**. På disse forbindelser skal også findes et aldehyd eller en keton, hvormed det kategoriseres som en **aldose** eller **ketose**. De mest normale sukre indeholder 5 eller 6 carbon og kaldes henholdsvis **pentoser** og **hexoser**, som vist i Figur 13.

Fischerprojektion

Monosakkarider findes både på åben form og lukket ringform. At tegne disse retvisende med 3D-struktur er svært og de illustreres i stedet som projektioner.

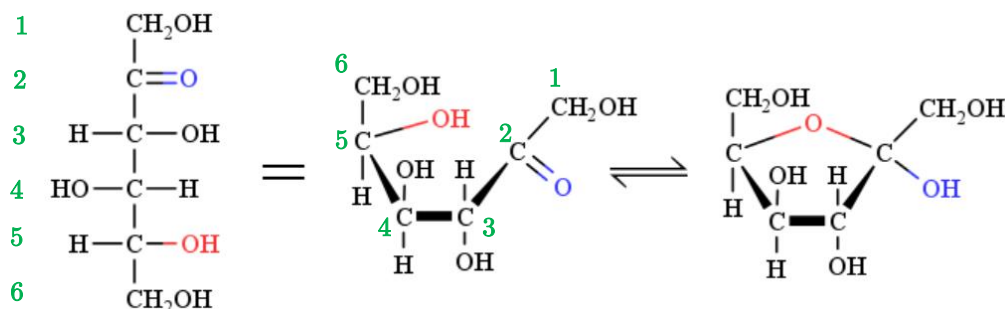
Fischerprojektionen bruges for den åbne form. Her tillægges tegning til højre og venstre betydning, og en ombytning mellem -H og -OH, angiver forskellige **spejlbilledisomerer**. Retningen på OH-gruppen på næstsidste carbon angiver om monosakkaridet er på **D-form** (højre) eller **L-form** (venstre), som vist i Figur 13, mens resten af navnet er et trivialnavn der angiver resten af OH-gruppernes placering.



Figur 13: Til venstre L-lyxose og til højre D-sorbose. L-lyxose er en pentose, en aldose og her på L-form. D-sorbose er en hexose, en ketose og her på D-form.

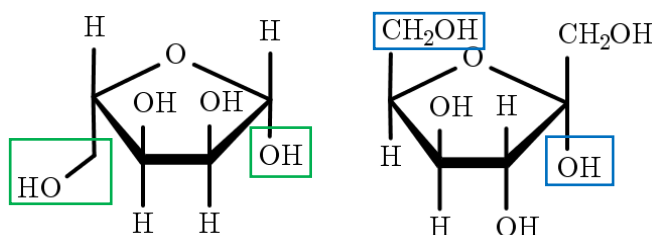
Harworthprojektion

Monosakkarider findes også på ringform, som dannes ved at forbinde oxo-gruppen med næstsidste carbon. I vand er omdannelse en ligevægt, der oftest er forskudt mod ringformen, som vist i Figur 14.



Figur 14: Ligevægt mellem åben form og ringform for D-sorbose. Bemærk at illustrationen til venstre og i midten begge er den åbne form, hvor den i midten blot er tegnet lidt sammenkrøllet.

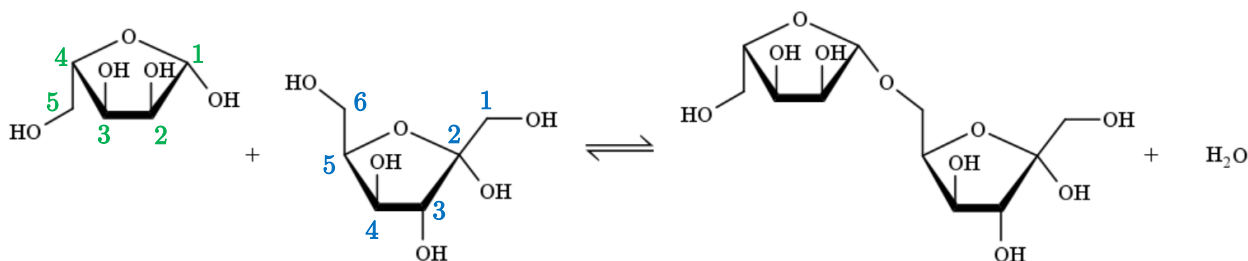
I **Harwothprojektion** vender en gruppe ned hvis den vender til højre i Fischerprojektion, med undtagelse af næstsidste C. For dette angiver sidste C op, at man har en D-form, og ned en L-form. Der dannes også en hydroxy-gruppe hvor der før var en oxo-gruppe. Denne kan både vende modsatte vej som sidste C eller samme, og kaldes henholdsvis **α -form** og **β -form**, som vist i Figur 15.



Figur 15: Til venstre Harwothprojektion for L-lysose og til højre D-sorbose.
L-lysose er på **β -form** og D-sorbose er på **α -form**.

Di- og polysakkarider

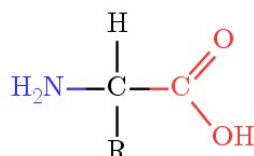
Ved en **kondensationsreaktion** mellem hydroxy-grupper i monosakkarider kan man danne di- og polysakkarider. Bindningen -O- der dannes kaldes en **glykosidbindingen**, og man angiver typisk hvilke nummer carbon den dannes mellem, som i Figur 16.



Figur 16: Kondensation mellem β -L-lysose og α -D-sorbose der danner et disakkarid.
Glykosidbindingen der dannes er en **$\beta(1\rightarrow6)$ -binding**.

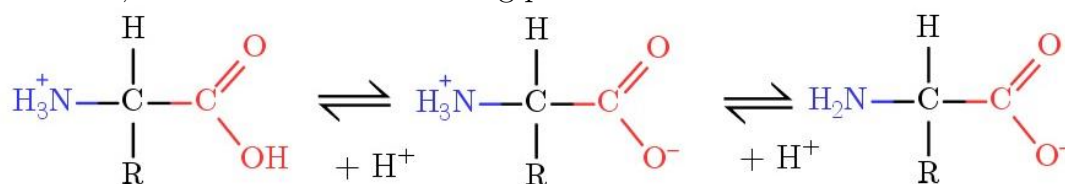
Proteiner

Proteiner er opbygget af polymerer af **aminosyrer**. Aminosyrer består af et carbon-atom bundet til et hydrogen, en amin, en carboxylsyre og et bestemt radikal. I **standardaminozyrerne** findes 20 forskellige radikaler. Radikalerne gør at aminosyrerne varierer i egenskaber som polaritet og syre-base-aktivitet. Hver af de 20 aminosyrer har trivialnavne, 3-bogstavsforkortelser og 1-bogstavsforkortelser.



Figur 17: En aminosyre med aminen (blå) og carboxylsyren (rød).

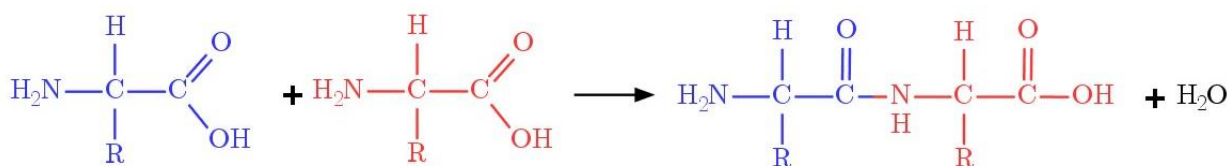
Aminosyrerne er alle amfolytter og besidder alle egenskaben at de kan lave syre-basereaktion med sig selv, hvorved de danner en **zwitter-ion**. Zwitter-ioner er stoffer der indeholder ioner, men har en samlet ladning på nul.



Figur 18: Aminosyre på syreform, zwitter-ion og baseform

Dipeptid

Når to aminosyrer **kondenserer** med hinanden, danner de et **dipeptid**, som i Figur 19. C-N-bindingen der dannes (som del af amidet) kaldes en **peptidbinding**.



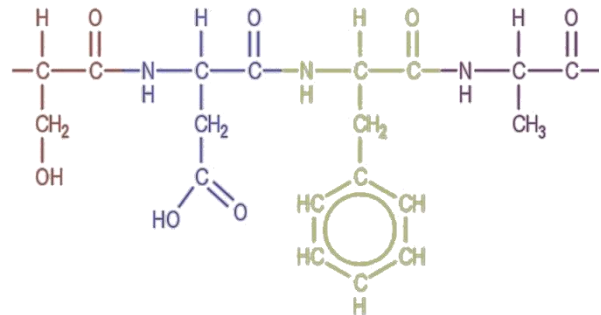
Figur 19: Kondensationsreaktion mellem to aminosyrer under dannelse af et dipeptid. Peptidbindingen er den mellem det blå C og det røde N.

Laves man yderligere kondensationer med flere aminosyrer kan man danne henholdsvis tripeptider, tetrapeptider osv. som fælles kaldes for **polypeptider**.

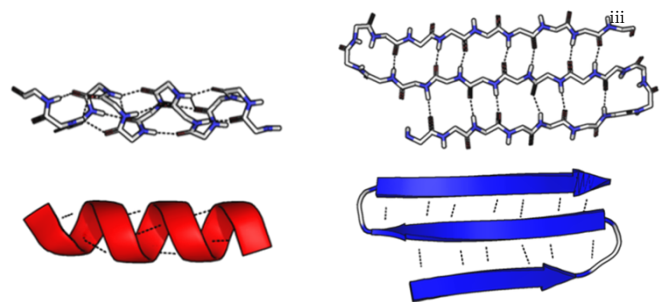
Proteinstruktur

Opbygningen af proteiner og hvordan de foldes kan man tale om på fire niveau.

Den **primære struktur** beskriver rækkefølgen af aminosyrer der sidder bundet sammen med **peptidbindinger** i proteinet, også kaldet *backbone'et*.

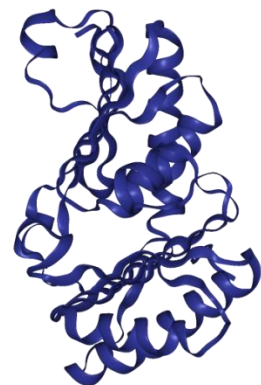
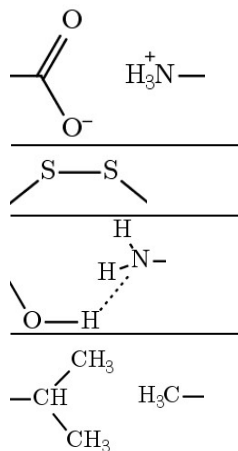


Den **sekundære struktur** beskriver hvordan proteinet danner **α -helixer** og **β -sheets**. Disse holdes begge sammen af **hydrogenbindinger** mellem amider på kryds af *backbone'et*.

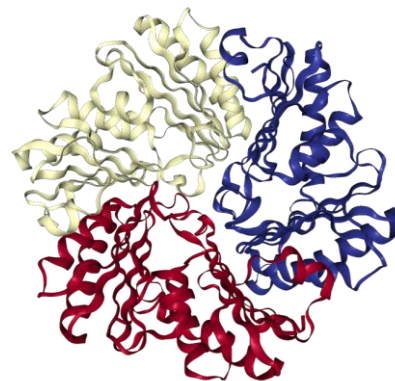


Den **tertiære struktur** beskriver hvordan α -helixer og β -sheets foldes yderligere sammen. Disse foldninger holdes sammen af alle mulige interaktioner, oplistet efter styrke eksempelvis:

- Ionbindinger
- Svovlbroer
- Hydrogenbindinger
- Upolære interaktioner.



Den **kvaternære struktur** beskriver hvordan flere terciære enheder holdes sammen. Dette sker ved samme interaktioner som i den terciære struktur.



iv

Reaktionskinetik

Elementarreaktioner

Elementarreaktioner er de trin som kemiske reaktioner foregår i. De kategoriseres efter hvor mange partikler der støder sammen.

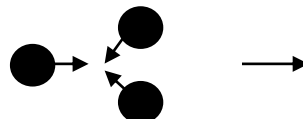
Unimolekylær – en partikel reagerer



Bimolekylær – to partikler reagerer



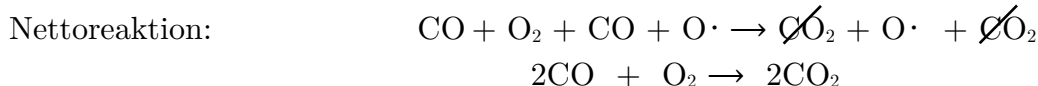
Trimolekylær – tre partikler reagerer



Elementarreaktioner med flere partikler er meget usandsynlige.

Reaktionsmekanisme

Når man opskriver en (netto)reaktion i alle dens trin (elementarreaktioner) kalder man det en **reaktionsmekanisme**. Når man lægger alle delreaktioner sammen giver det **nettoreaktionen**.

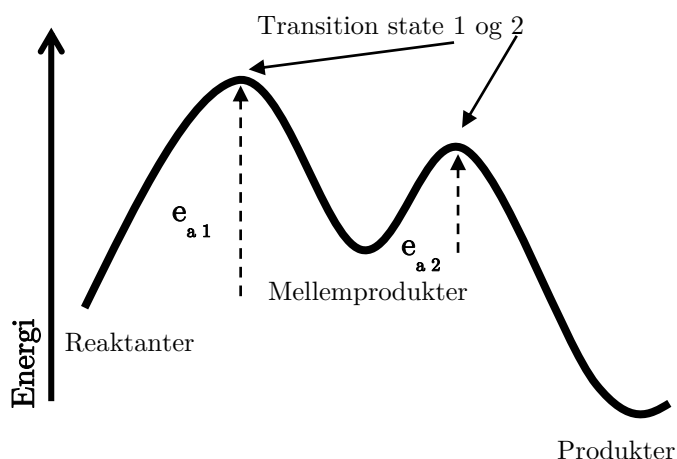


I reaktionsmekanismen kan man se at $\text{O}\cdot$ er et **mellemprodukt** for nettoreaktionen, mens CO og O_2 er **reaktanter** og CO_2 er **produkt**.

Energiprofil

En reaktionsmekanisme kan vises i et energidiagram ved at tegne alle trins energi ind i en figur.

For at lave en delreaktion skal der dannes et **transition state** som er det mest ustabile trin reaktionen skal igennem (højest energi). Energien det koster at komme fra reaktanter til *transition state* kaldes **aktiveringsenergien**, e_a .

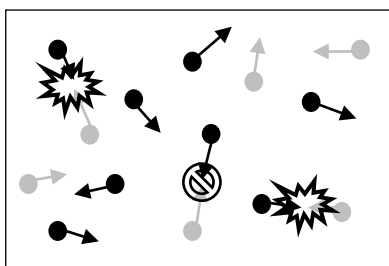


Påvirkning af reaktionshastighed

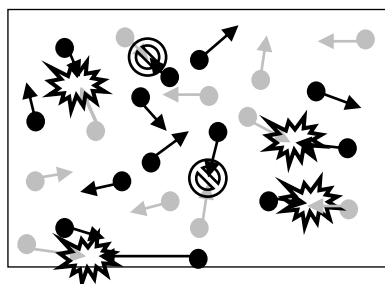
Hvis man skal øge en reaktionshastighed, skal man som udgangspunkt have flere kollisioner der har samme eller højere energi end aktiveringsenergien, og dermed laver reaktion. Dette kan opnås på flere måder:

Højere koncentration/ partialtryk.

Hvis der er flere partikler, vil der være flere sammenstød, og dermed også flere sammenstød der når aktiveringsenergien.



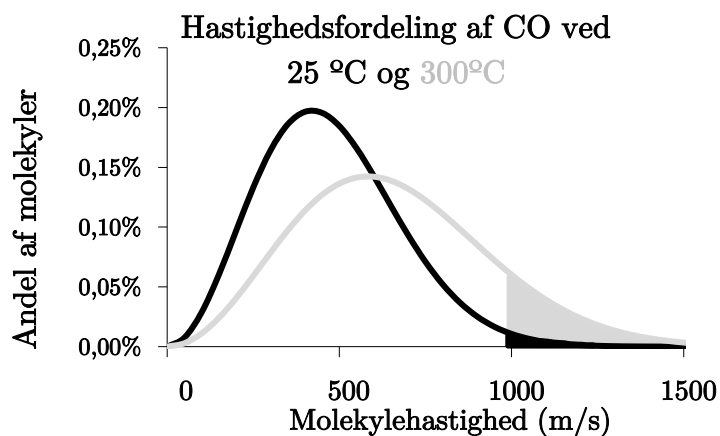
Lav koncentration/partialtryk



Høj koncentration/partialtryk

Højere temperatur.

Når temperaturen er højere, har partiklerne højere gennemsnitsenergi, så flere af kollisionerne der sker, har en energi der når aktiveringsenergien.



Orientering eller skærmning.

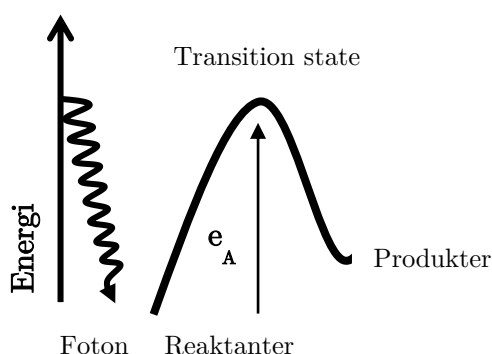
Hvis en reaktion skal ske, skal molekylerne vende "rigtigt." Det er svært at gøre noget ved. Men sammenligner man molekyler kan man sige, at et skærmet reaktionsite er sværere at komme til og reaktionshastigheder dermed langsommere for sådanne molekyler.

Større overfladeareal (faste stoffer).

Faste stoffers reaktionshastighed afhænger af hvor mange molekyler der sidder på overfladen af det faste stof. Hvis overfladen er større (mindre partikler) kan der ske flere kollisioner, og dermed kan reaktionshastigheden forøges.

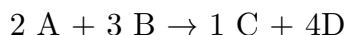
Lys.

Fotokemiske reaktion kan opnå aktiveringsenergien ved at absorbere fotoner. Disse fotoners energi(bølgelængde) skal matche ret præcist med aktiveringsenergien for at det hjælper på reaktionshastigheden.



Hastighedsudtryk

Faldet i koncentrationen af reaktanter eller stigningen i koncentrationen af produkter kan opskrives i et **hastighedsudtryk**. Enheden på hastighedsudtrykket vil være i M/s.



Reaktionshastigheden, v , for reaktionen ovenfor kan altså udtrykkes på følgende måder.

$$-\frac{\Delta A}{\Delta t} = v_A \text{ eller } -\frac{\Delta B}{\Delta t} = v_B \text{ eller } \frac{\Delta C}{\Delta t} = v_C \text{ eller } \frac{\Delta D}{\Delta t} = v_D$$

Med relationerne jf. koefficienterne

$$\frac{1}{2} v_A = \frac{1}{3} v_B = v_C = \frac{1}{4} v_D$$

Hastighedsudtrykket kan bestemmes generelt ud fra reaktanternes aktuelle koncentration

$$v = k \cdot [A]^x \cdot [B]^y$$

Hvor x og y kaldes **orden** og bestemmes eksperimentelt. k er **hastighedskonstanten** og er unik for reaktionen, og afhænger af temperatur og aktiveringsenergi.

Lavet af Jonas Niemann, Gentofte HF, gymnasiekemi.mail@gmail.com

Tak til kemilærergruppen på facebook for rettelser og korrektur.

Kemiske strukturer og reaktioner er lavet med

MarvinSketch 17.1.16; 2017; ChemAxon; <http://www.chemaxon.com>

Illustrationer, foruden de nedenstående, er lavet med

Gimp 2.10.30; 2021; <https://www.gimp.org/>

og

Microsoft 365 Apps; 2016 <https://www.microsoft.com/da-dk/microsoft-365>

ⁱ Illustration af det elektromagnetiske spektrum lavet ud fra

Ronan, P; Wikimedia Commons; https://commons.wikimedia.org/wiki/File:EM_spectrum.svg

ⁱⁱ Farvehjul fra

Németh, L; Wikimedia, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:RGB_color_wheel_24.svg

ⁱⁱⁱ Illustrationer af Alfa-helixer og beta-sheets lavet ud fra

Shafee, T; [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Alpha_beta_structure_\(full\).png](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Alpha_beta_structure_(full).png)

^{iv} Illustrationer af tertiær og kvartenær struktur lavet ud fra

4I61 Crystal structure of a trimeric bacterial microcompartment shell protein PduB

(Pang, A.H., Prentice, M.B., Pickersgill, R.W. Propionaldehyde does not bind to PduB, endnu ikke publiceret)

med NGL (A.S. Rose, A.R. Bradley, Y. Valasatava, J.D. Duarte, A. Prlić, P.W. Rose (2018) NGL viewer: web-based molecular graphics for large complexes. Bioinformatics 34: 3755–3758)