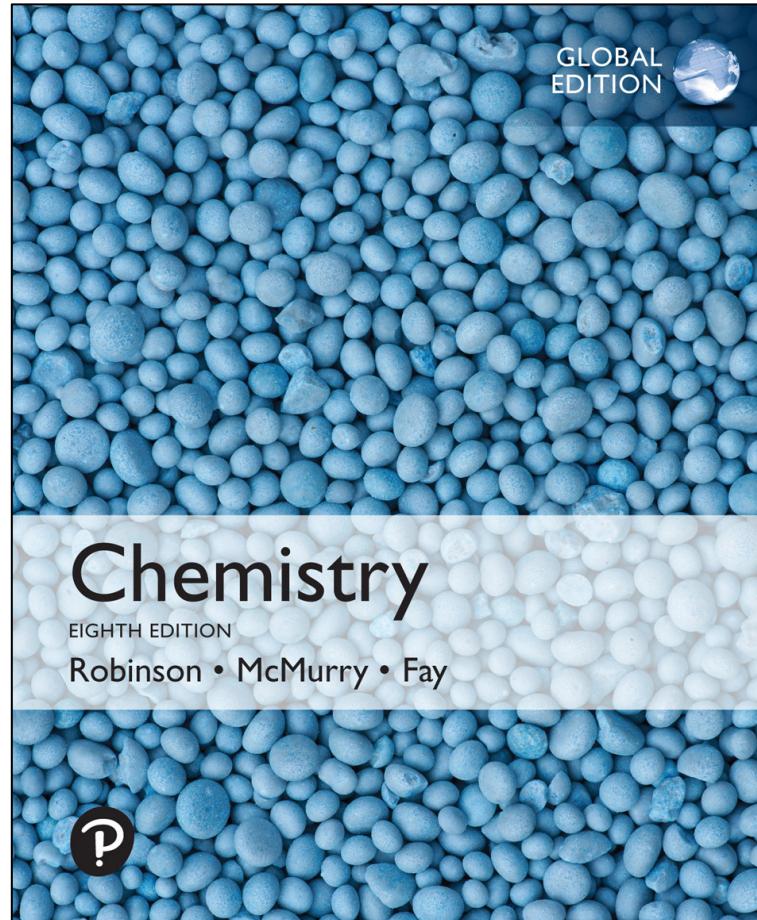


26050 Kemi for Life Science



Sebastian, semei@kemi.dtu.dk, bygning 206 rum 208

<http://learn.inside.dtu.dk>

DTU 26050 Chemistry for Life Science Fall 23

Course Admin My Course Activities Content Assignments Discussions Video & Streaming Help

Table of Contents > Generel information > Kursusplan_Læseliste

Kursusplan_Læseliste

Læseliste - 26050- E2023

Underviser: Sebastian Meier, E-mail: semei@kemi.dtu.dk

Bog: Robinson, McMurry, Fay-Chemistry, 8th edition, Pearson.

Forelæsninger: hver tirsdag kl 13–15 (max); første gang 29.8.2023, Byg 306-A32

Lektion	Bogkapitel	Emner i bogen	Opgaveregning:
			<ul style="list-style-type: none">• opgaver på DTU Learn• obligatoriske afleveringer,• de viste opgaver i bogen

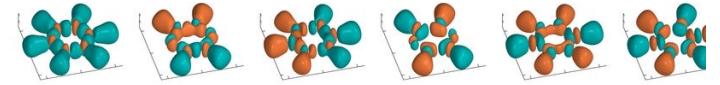
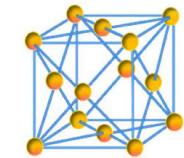
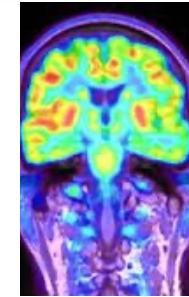
Anbefalet forløb:

- Læs bogen, se videoer
- Tag kort quiz på DTU Learn for at gentage vigtige punkter
- Tænk kort over slides med opgaver
og afklar uklare ting, deltag i Socrative og kahoot
- Opgaveregning (facit kommer i løbet af
eftermiddagen; prioritet til opgaver som er lagt på learn)

Eksamens

3 obligatoriske opgavesæt – afleveres via DTU
Learn i ugen efter 4., 8. og 12. lektion

14.12.2023 Eksamens (ingen internetadgang)

- 1 Kemisk regning, periodisk system, navngivning
 - 2 Reaktionsligninger
 - 3 Elektroner, orbitaler og periodiske trends
 - 4 Bindinger
 - 5 Energi
 - 6 Faste stoffer og oplosninger
 - 7 Reaktionskinetik
 - 8 Ligevaegt
 - 9 Ligevaegtsberegninger
 - 10 Drivkraft af kemiske reaktioner
 - 11 Kernekemi
 - 12 Overgangsmetaller og komplekser
 - 13 Organisk og biologisk kemi
- 
- 
- 
- 

A. Videnskabelig notation, dimensionsanalyse

$$a \times 10^n$$

mellem 1 og 10 heltal

The diagram illustrates the components of scientific notation. The symbol $a \times 10^n$ is shown in black. To its left, the text "mellem 1 og 10" is written in red, with a black arrow pointing from it to the digit "a". To the right of the symbol, the text "heltal" is written in blue, with a black arrow pointing from it to the exponent "n".

**signifikanten (mantissen) roden/ eksponenten
basis**

Videnskabelig notation

$3,0 \times 10^3$ gram

Positionstalsystem

3000 gram

Enhedsmodifikatorer

3 kilogram

Talesprog

Tre tusinde gram

Kroppen indeholder ca. $4 \cdot 10^{13}$ bakterie celler og 30 billioner humane celler. Hvad er forholdet mellem antallet af bakterie celler og humane celler?

$$30 \text{ billioner} = 3 \cdot 10^{13}$$

trilliard	10^{21}
trillion	10^{18}
billiard	10^{15}
billion	10^{12}
milliard	10^9
million	10^6
tusind	10^3

Enhedsmodifikatorer (dekadiske præfikser) bruger et ord for at beskrive størrelsesorden

TABLE 1.2 Some Prefixes for Multiples of SI Units. The most commonly used prefixes are shown in red.

Factor	Prefix	Symbol	Example
$1,000,000,000,000 = 10^{12}$	tera	T	1 teragram (Tg) = 10^{12} g
$1,000,000,000 = 10^9$	giga	G	1 gigameter (Gm) = 10^9 m
$1,000,000 = 10^6$	mega	M	1 megameter (Mm) = 10^6 m
$1000 = 10^3$	kilo	k	1 kilogram (kg) = 10^3 g
$0.1 = 10^{-1}$	deci	d	1 decimeter (dm) = 0.1 m
$0.01 = 10^{-2}$	centi	c	1 centimeter (cm) = 0.01 m
$0.001 = 10^{-3}$	milli	m	1 milligram (mg) = 0.001 g
$*0.000\ 001 = 10^{-6}$	micro	μ	1 micrometer (μ m) = 10^{-6} m
$*0.000\ 000\ 001 = 10^{-9}$	nano	n	1 nanosecond (ns) = 10^{-9} s
$*0.000\ 000\ 000\ 001 = 10^{-12}$	pico	p	1 picosecond (ps) = 10^{-12} s
$*0.000\ 000\ 000\ 000\ 001 = 10^{-15}$	femto	f	1 femtomole (fmol) = 10^{-15} mol

$$1 \text{ \AA} = \text{en \AAngstr\o m} = 10^{-10} \text{ m} \\ = 0,1 \text{ nm} = 100 \text{ pm}$$

Der er kun 7 fundementale enheder, alle andre enheder kan udledes fra disse 7 enheder

TABLE 1.1 The Seven Fundamental SI Units of Measure

Physical Quantity	Name of Unit	Abbreviation
Mass	kilogram	kg
Length	meter	m
Temperature	kelvin	K = temp i °C + 273,15
Amount of substance	mole	mol
Time	second	s
Electric current	ampere	A
(Luminous intensity	candela	cd)

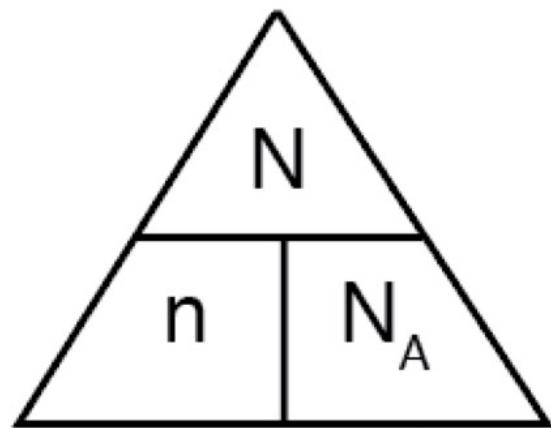
$$ladning \quad 1 C = 1 A \times s$$

$$energi \quad 1 J = 1 \frac{kg \cdot m^2}{s^2}$$

$$\text{Elektrisk potentiale} = \text{energi}/\text{ladning} \quad 1 V = 1 \frac{J}{C}$$

**Et mol er $6,022 \times 10^{23}$
(antal atomer i 12 g ^{12}C)**

**Omregning fra antal partikler N til
stofmængde n i mol**



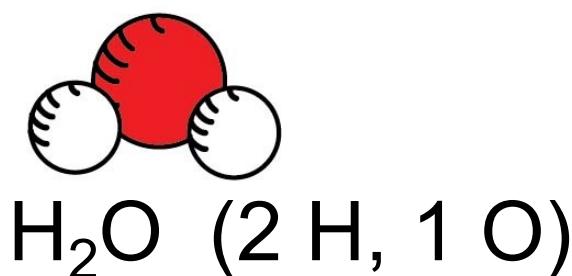
$$N = 6,022 \times 10^{24}$$

$$n = 10 \text{ mol}$$

$$N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

(Avogadros konstant)

**Grundstoffatomer går sammen i
enkelte stofmængdeforhold**



Dimensionsanalyse

bruges til at få enhederne til at gå op

For at omregne til den ønskede enhed, skal man gange med noget der svarer til 1/1.

Den **nye enhed** står i tælleren og den **gamle** i nævneren (f. eks. **1 kg/1000 g = 1/1**).

En menneskelig celle vejer 3,5 ng. Hvor mange kg svarer det til?

$$3,5 \text{ ng} = 3,5 \times 10^{-9} \text{ g} \times \frac{1}{1000} = 3,5 \times 10^{-9} \text{ g} \times \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} = 3,5 \times 10^{-12} \text{ kg}$$

For at omregne **enheder i nævneren, skal man også gange med noget der svarer til 1/1.**

Den nye enhed i nævneren og den gamle i tælleren (f. eks. **60 min/(1 h)).**

Hjertet slog 70 gange per minut. Hvor tit per time?

$$70 \frac{1}{min} = 70 \frac{1}{min} \times \frac{1}{1} = 70 \frac{1}{min} \times \frac{60 \text{ min}}{1 \text{ h}} = 4200 \frac{1}{h}$$

For rumfang tag omregningsfaktoren for længde i tredje potens

Flydende nitrogen N₂ bruges som kølemiddel ved -196 °C med 0,808 g/cm³ densitet.

Hvor mange kg/dm³ er 0,808 g/cm³ ?

$$0,808 \text{ g/cm}^3 \times \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} \times \left(\frac{10 \text{ cm}}{1 \text{ dm}}\right)^3 = 0,808 \times \frac{10^3}{10^3} \text{ kg/dm}^3$$

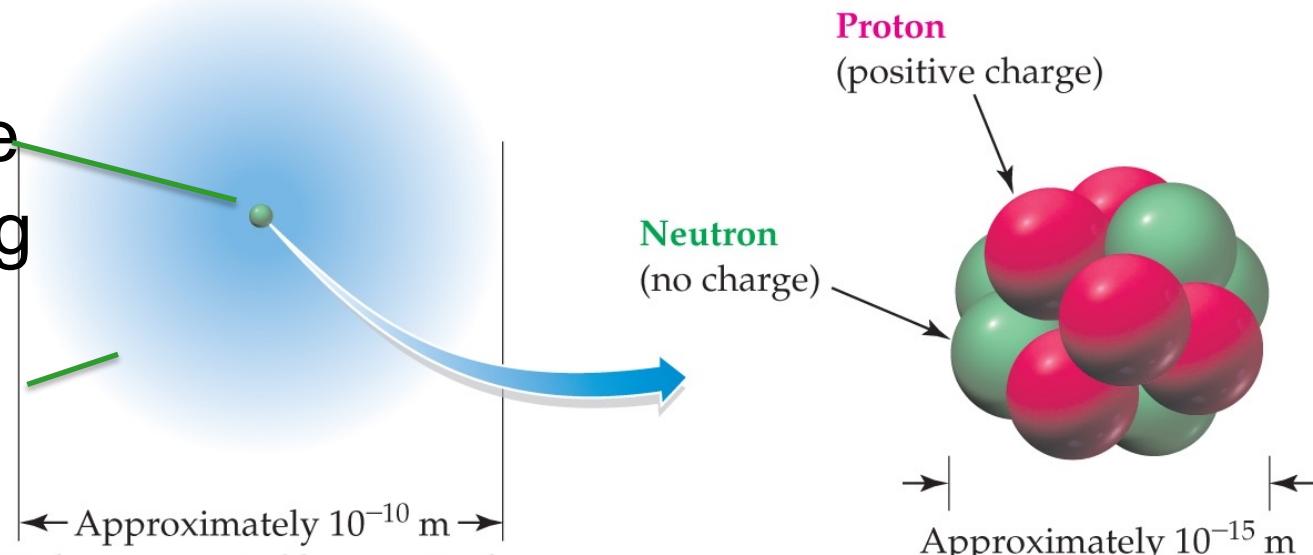
g/cm³ er det samme som kg/L (1 dm³=1 L)

Atomet er ca. 10^{-10} m i diameter, atomkernen ca. 1 fm (10^{-15} m) stor

atomet har ca. 10^5 gange større diameter og 10^{15} gange (billiard) større rumfang end kernen.

Kerne: masse
positiv ladning

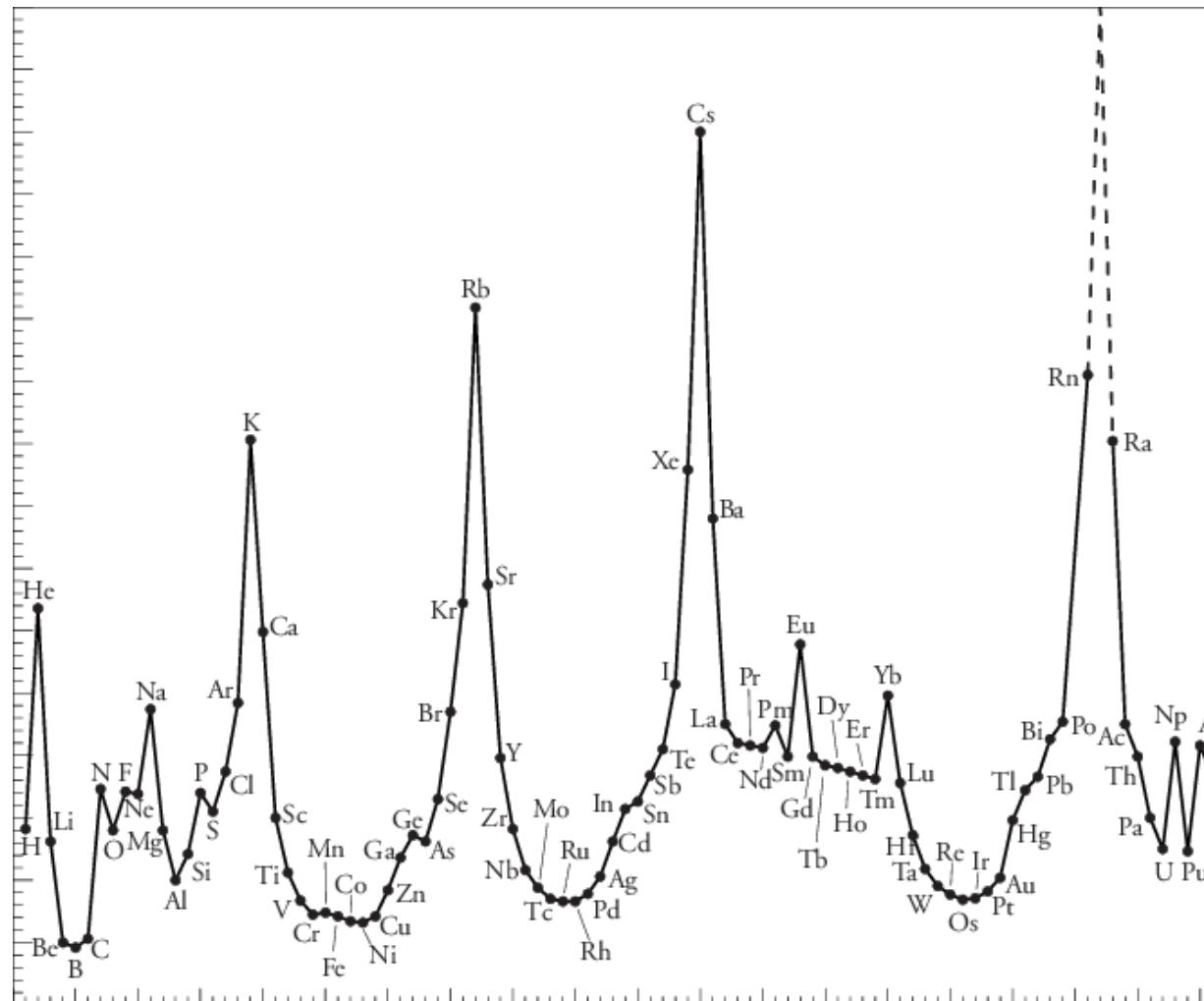
Elektronsky:
volumen
negativ ladning



Atomer er opbygget af protoner og neutroner i kernen samt elektroner

B. Grundstoffer, Det Periodiske System

Rumfang



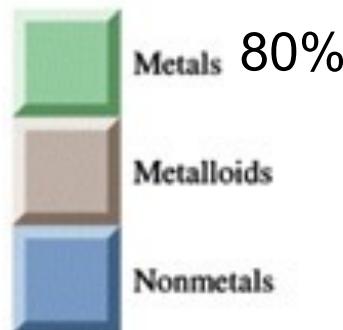
Antal protoner
bestemmer hvilket grundstof det er

Det Periodiske System

Grupper 1,2,13-18=Hovedgrupperne

The image shows the periodic table of elements. Several groups are highlighted with orange boxes and arrows pointing to them from labels on the left:

- Alkalimetaller**: Points to Group 1 (H, Li, Na, K, Rb, Cs, Fr).
- Jordalkalimetaller**: Points to Group 2 (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra).
- periode**: Points to the horizontal rows of the table.
- overgangsmetaller**: Points to the transition metals (Groups 3-12).
- Gruppe**: Points to Group 13 (B, Al, Ga, In, Tl).
- Halogener**: Points to Group 17 (F, Cl, Br, I, At).
- Ædelgasser**: Points to Group 18 (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn).



This table lists elements that do not have a standard number assigned by the IUPAC. They are grouped into four categories:

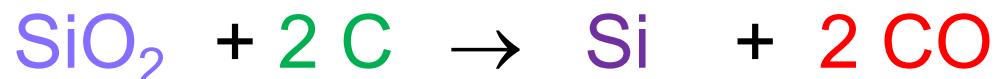
- Metals**: Ce, Pr, Nd, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm.
- Metalloids**: None listed.
- Nonmetals**: None listed.
- indre overgangsmetaller**: 14 unnumbered elements: Er, Tm, Yb, Lu, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn.

metaller, ikke-metaller og halvmetaller

Vindenergi og solceller er afhængige af (nok/billig) Cu (kobber), Si (silicium)



f eks



Silicium dioxid

Silica, sand



Elektromobilitet bruger (nok/billig)
Li (lithium), Co (kobolt), Ni (nikkel)



Ved 25 °C og 1 bar tryk

11 gasformige (gult),

2 flydende (brom, kviksølv),

resten fast (grønt)

1	H	2	He
3	Li	4	Be
11	Na	12	Mg
19	K	20	Ca
37	Rb	38	Sr
55	Cs	56	Ba
87	Fr	88	Ra
21	Sc	22	Ti
39	Y	40	Zr
72	Hf	73	Ta
104	Rf	105	Db
74	W	75	Re
106	Sg	107	Bh
76	Os	77	Ir
108	Hs	109	Mt
78	Pt	79	Au
110	Ds	111	Rg
79	Hg	80	Cn
112		113	Nh
81	Tl	82	Fl
83	Pb	84	Mc
85	Bi	86	
31	Ga	32	Ge
45	Rh	46	Pd
47	Ag	48	Cd
49		50	In
51		52	Sn
52		53	Sb
53		54	Te
54		55	I
33	Ga	34	As
48		35	Se
49		36	Br
50		51	Kr
51		52	
52		53	Xe
53		54	
54		55	
55		56	
56		57	
57		58	
58		59	
59		60	
60		61	
61		62	
62		63	
63		64	
64		65	
65		66	
66		67	
67		68	
68		69	
69		70	
70		71	
71			

57	La	58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb	71	Lu
89	Ac	90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No	103	Lr

7 grundstoffer optræder under disse betingelser som diatomiske (to atomer forbundet sammen) molekyler:



(antal atomer af et grundstof i forbindelser skrives som indeks)

Der er forskellige versioner af grundstofferne med forskellige antal neutroner. Disse versioner hedder isotoper.



1–



1–



1–

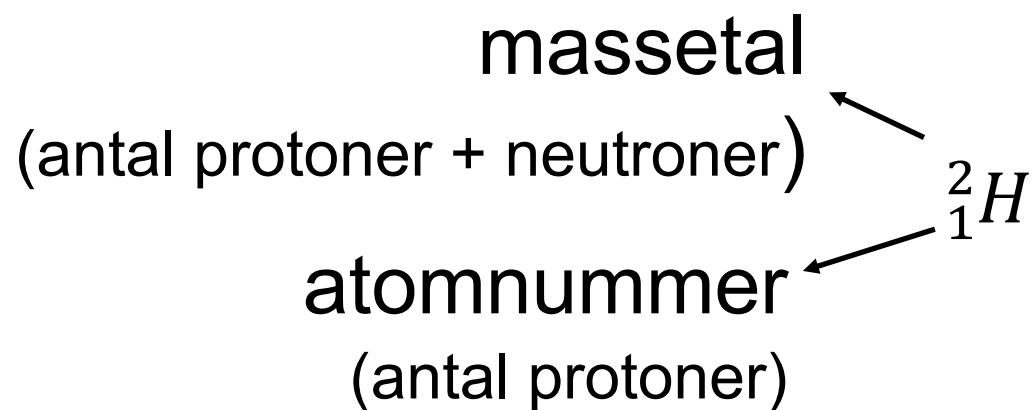


stabil

stabil

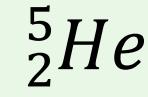
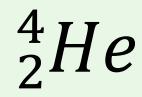
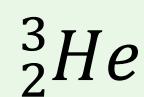
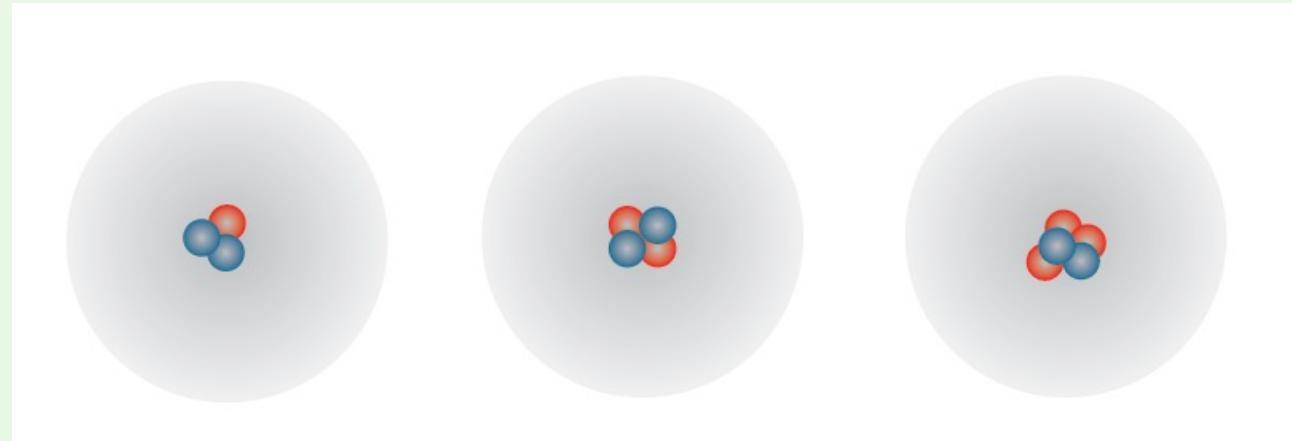
**ustabil isotop
(radioaktiv)**

Isotopnotation for versioner af grundstofferne:



Antal neutroner=massetal minus atomnummer

Opskriv de følgende isotoper af samme grundstof i isotopnotation



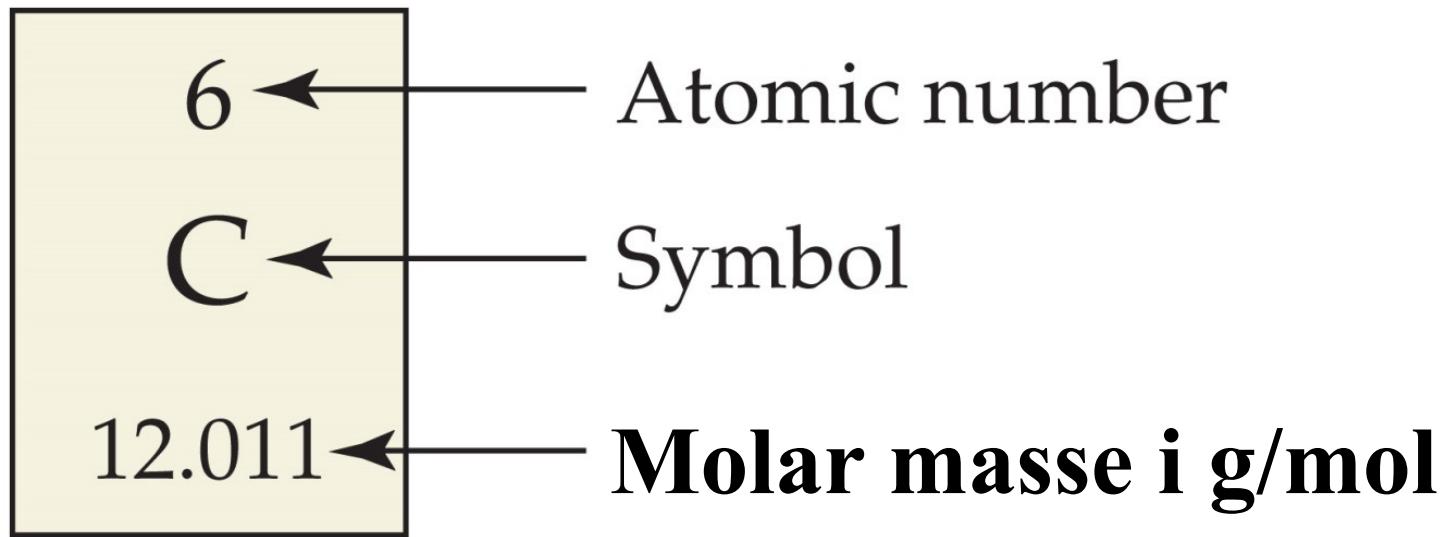
"Helium – 3" "Helium – 4" "Helium – 5"

Atomkernen for kalium-40 ($^{40}_{19}K$) er ustabil (radioaktiv): den omdannes ved at én proton bliver til én neutron. Hvilken atomkerne dannes?



19	protoner	18
21	neutroner	22

Den gennemsnitlige masse af 1 mol grundstofatomer på Jorden kan aflæses i det periodiske system



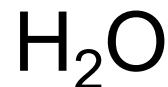
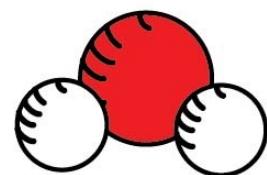
^{12}C : 12 g/mol, 98,89% af C på jorden

^{13}C : 13,0034 g/mol, 1,11%

Isotopmasse og fordelingen mellem isotoperne måles med massespektrometri

Atomer kan gå sammen til klynger med helt nye egenskaber

Den molare masse for et molekyle er summen af atommasserne, der kan findes i det periodiske system



$$\begin{array}{rcl} 1\text{O} & & 16,00 \text{ g/mol} \\ 2\text{H} & + 2 \times 1,01 \text{ g/mol} \\ \hline \text{H}_2\text{O} & & 18,02 \text{ g/mol} \end{array}$$

(ingen masse går tabt)

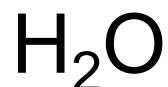
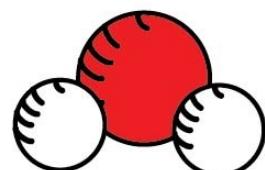
Masseandelen af et grundstof i molekylet betegnes som **masseprocent** (feks $2,02/18,02=11,2\%$ H i H_2O).

Masseprocent

er uafhængig af mængden:

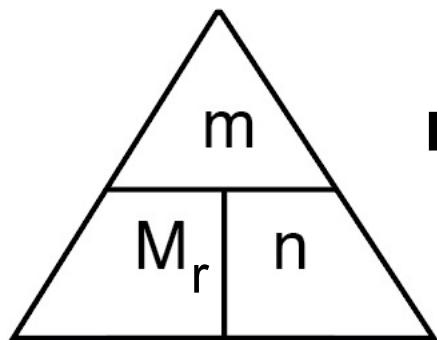
11,2 masseprocent H i vandmolekylet

11,2 masseprocent H i vand (112 g i 1 liter)



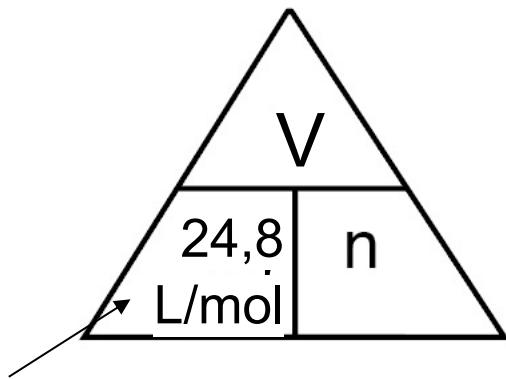
$$\begin{array}{rcl} & \begin{array}{ll} 1\text{O} & 16,00 \text{ g/mol} \\ 2\text{H} & + 2 \times 1,01 \text{ g/mol} \end{array} \\ \hline & \begin{array}{l} \text{H}_2\text{O} \\ 18,02 \text{ g/mol} \end{array} \end{array}$$

**Vand vejer 18,02 g/mol (M_r).
Hvad vejer 10 mol (n) vand?**



$$m = 18,02 \text{ g/mol} * 10 \text{ mol} = 180,2 \text{ g}$$

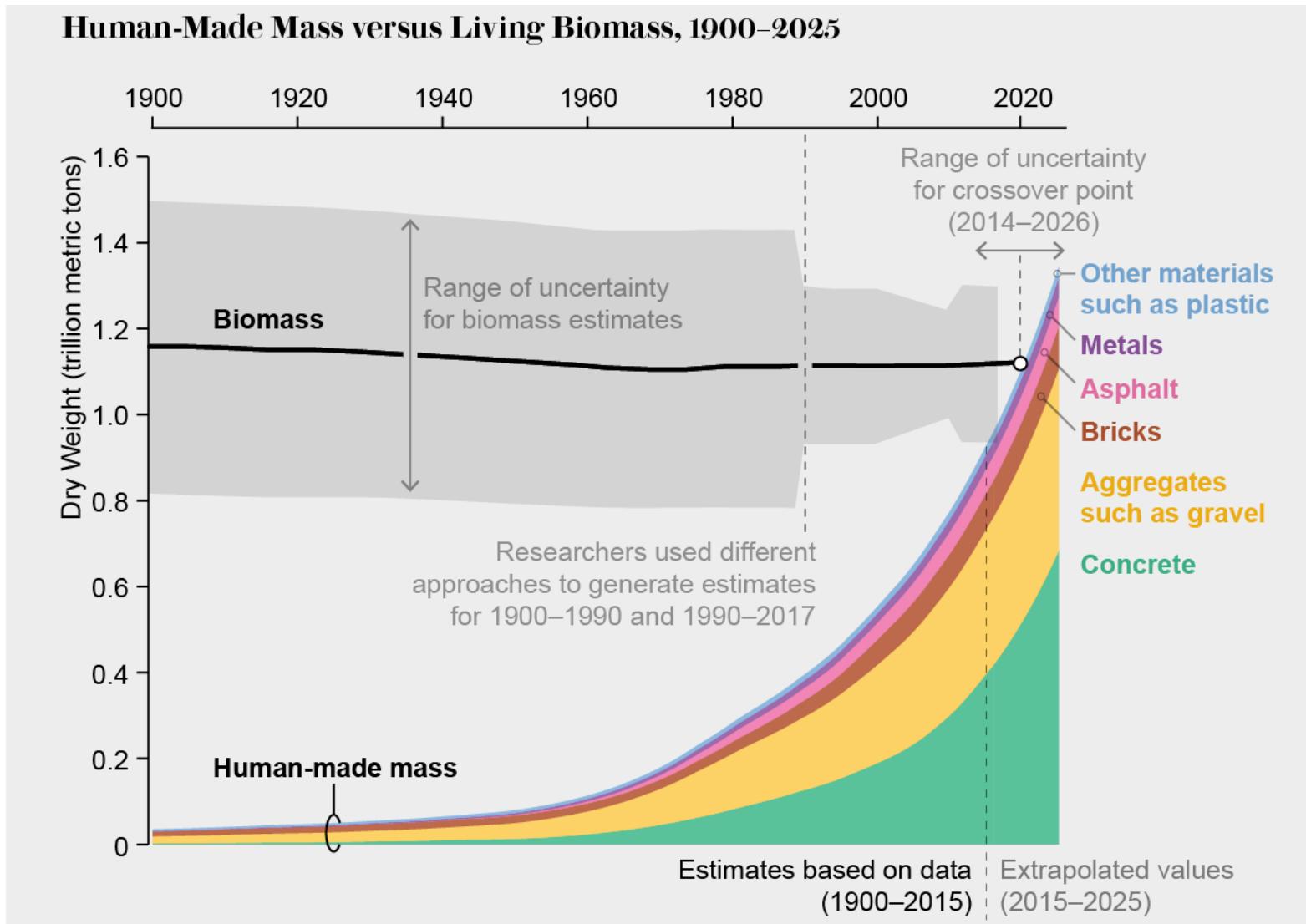
I forbrændingen af 1,2 kg kul frigives 100 mol CO₂ gas. Hvilket volumen (V) har 100 mol (n) CO₂ gas?



$$V = 24,8 \text{ L/mol} * 100 \text{ mol} = 2480 \text{ L}$$

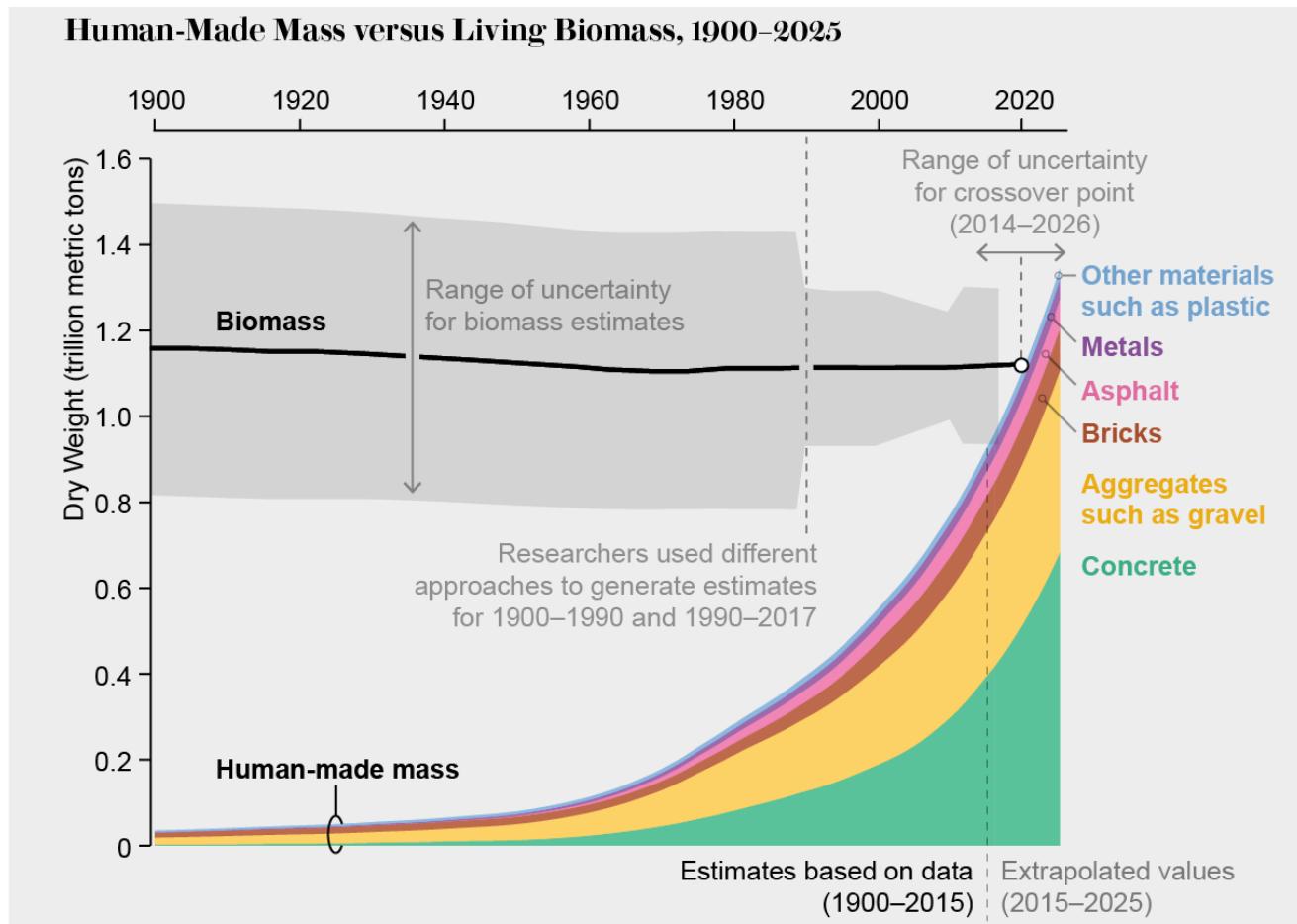
for alle gasser ved 25 °C, 1 bar

Menneske-skabte ting vejer nu mere end alt liv på jorden



plast alene er dobbelt så meget som alle dyr tilsammen

Cement produktion udleder meget CO₂



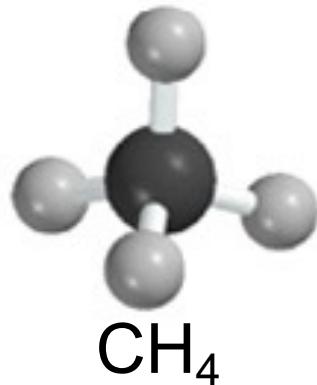
IUPAC navne: calciumcarbonat calciumoxid carbondioxid

Ældre trivialnavne

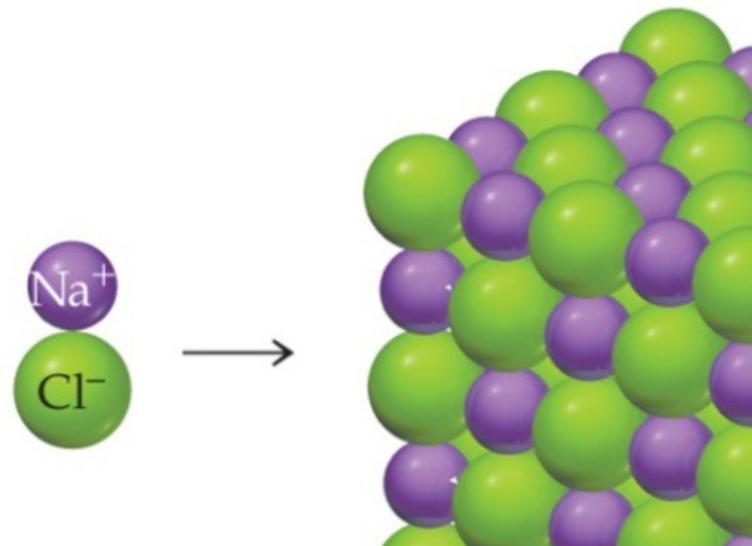
kulsur kalk brændt kalk kultveilte/kuldioxid

C. Forbindelser og navngivning

“binære forbindelser” indeholder 2 grundstoffer

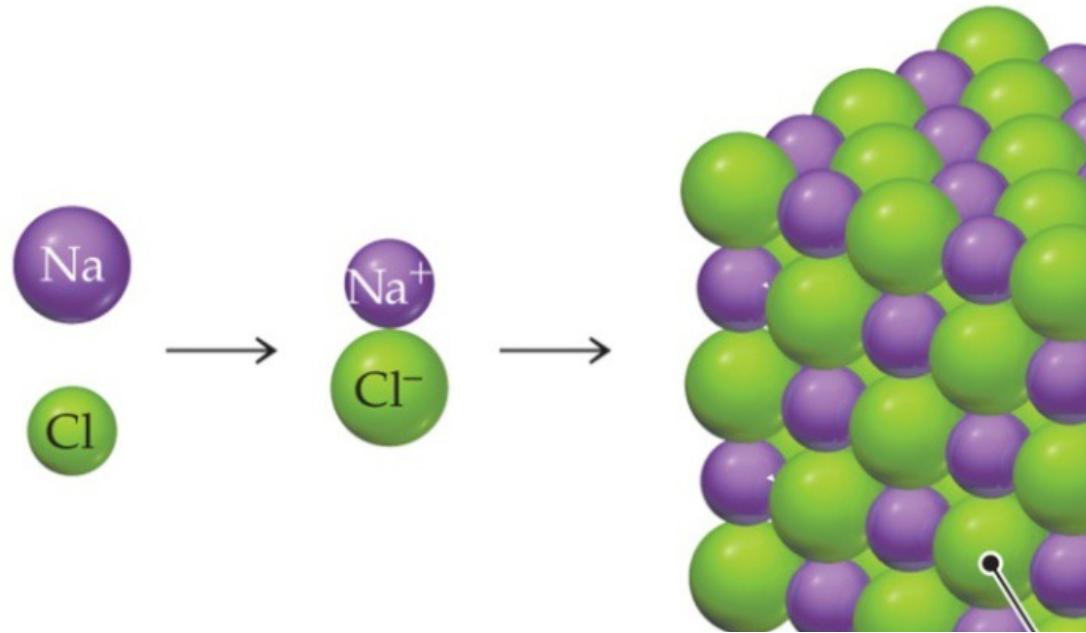


*et molekyle
(klynge af atomer
sammenholdt af
kovalente bindinger)*



en ionforbindelse

En neutral* forbindelse mellem kationer (+) og anioner (-) hedder et salt (ionforbindelse).



Coulomb's Law

$$F = \frac{k q_1 q_2}{r^2}$$

Coulomb constant (gets the units right)

Charges (in Coulombs)

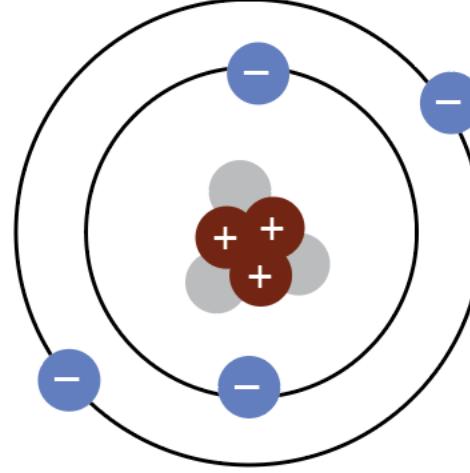
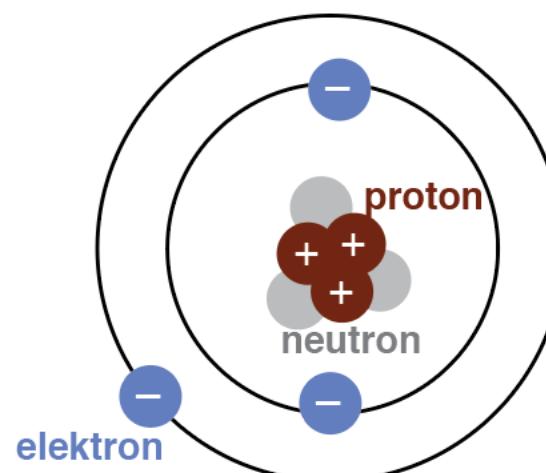
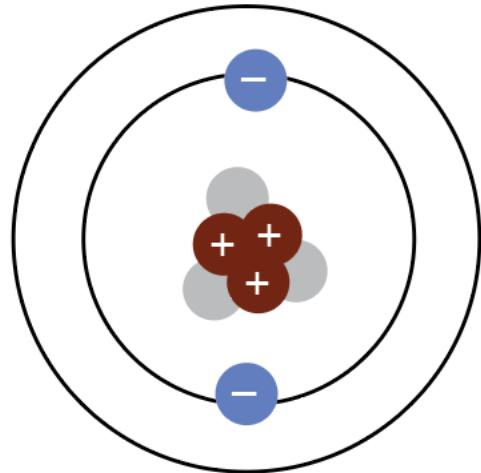
Force
 $F < 0$ attractive
 $F > 0$ repulsive

Distance between charges

Typisk forbindelser mellem metalkation og ikke-metal anion (undtagelse hvis NH_4^+ er kationen)

*Summen af ladningerne i et salt skal være 0!

En **ion** er et atom eller et molekyle, der har optaget eller afgivet en eller flere elektroner og derved fået en elektrisk ladning



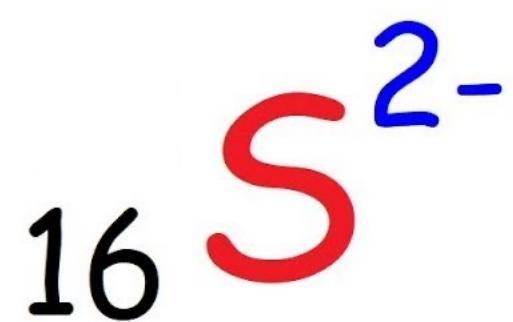
ladningen skrives som superskript med arabiske tal, "1" undlades; f. eks. Ca^{2+}

Hvor mange elektroner er der i



13 protoner og 10 elektroner
giver netto ladning 3+

10 elektroner ligesom Neon



16 protoner og 18 elektroner
giver netto ladning 2-

18 elektroner ligesom Argon³⁵

Foretrukken ionisk ladning efter gruppe

så mange elektroner som det forrige eller næste ædelgas

1+ 2+		3+	3- 2- 1-		
1 1A					18 8A
H ⁺ H ⁻ Hydride	2 2A	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A
Li ⁺ 3	Be ²⁺ 4			N ³⁻ Nitride 7	O ²⁻ Oxide 8
Na ⁺ 11	Mg ²⁺ 12	Al ³⁺ 13		S ²⁻ Sulfide 16	F ⁻ Fluoride 9
K ⁺	Ca ²⁺	Ga ³⁺		Cl ⁻ Chloride 17	Ne 10
Rb ⁺	Sr ²⁺	In ³⁺	Sn ²⁺ Sn ⁴⁺	Se ²⁻ Selenide	Ar 18
Cs ⁺	Ba ²⁺	Tl ⁺ Tl ³⁺	Pb ²⁺ Pb ⁴⁺	Te ²⁻ Telluride	Kr
				I ⁻ Iodide	Xe

Simple anioner får endelsen –id

Kationers navne skrives med romerske tal i parentes hvis der er flere muligheder for ladningen ("polyvalente ioner"):

Na⁺ - sodium, Fe²⁺ - jern(II), Fe³⁺ - jern(III)

3 Li +1	4 Be +2													
11 Na +1	12 Mg +2													
		3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8	9 8B	10	11 1B	12 2B			
19 K +1	20 Ca +2	21 Sc +3	22 Ti +4 +3 +2	23 V +5 +4 +3 +2	24 Cr +6 +5 +4 +3 +2	25 Mn +7 +6 +4 +3 +2	26 Fe +3 +2	27 Co +3 +2	28 Ni +2 +1	29 Cu +2 +1	30 Zn +2	31 Ga +3		
37 Rb +1	38 Sr +2	39 Y +3	40 Zr +4	41 Nb +5 +4	42 Mo +6 +4 +3	43 Tc +7 +6 +4 +3	44 Ru +8 +6 +4 +3	45 Rh +4 +3 +2	46 Pd +4 +2	47 Ag +1	48 Cd +2	49 In +3	50 Sn +4 +2	
55 Cs +1	56 Ba +2	57 La +3	72 Hf +4	73 Ta +5	74 W +6 +4	75 Re +7 +6 +4	76 Os +8 +4	77 Ir +4 +3	78 Pt +4 +2	79 Au +3 +1	80 Hg +2 +1	81 Tl +3 +1	82 Pb +4 +2	83 Bi +5 +3

Ioner med flere atomer

TABLE 2.5 Some Common Polyatomic Ions

Formula	Name	Formula	Name
Cation			
NH_4^+	Ammonium		
Singly charged anions			
CH_3CO_2^-	Acetate	Doubly charged anions	
CN^-	Cyanide	CO_3^{2-}	Carbonate
NO_2^-	Nitrite	O_2^{2-}	Peroxide
NO_3^-	Nitrate	SO_4^{2-}	Sulfate
HCO_3^-	Hydrogen carbonate (or bicarbonate)	Triply charged anion	
OH^-	Hydroxide	PO_4^{3-}	Phosphate

O_2^{2-} = peroxid; O_2^- = superoxid (anion-navn er entydigt)

Hvis der er mere end én af disse ioner, bruges parenteser i formlen: $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$

Navngivning af ionforbindelser

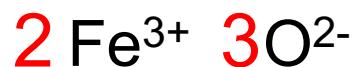
Skriv og navngiv kation først, anion sidst.

Ladning af kation i parentes hvis der er flere muligheder.



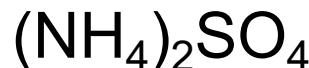
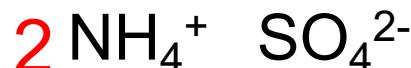
kaliumoxid

19
K +1



jern(III)oxid

26
Fe +3
+2



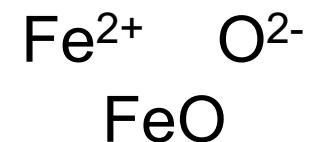
ammoniumsulfat

Navngivning af ionforbindelser

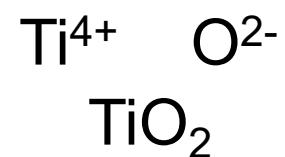
Vores måne har områder med farvetoner grundet tilstedeværelse af jern(II)oxid og titan(IV)oxid. Opskriv de kemiske formler for jern(II)oxid og titan(IV)oxid.



jern(II)oxid



titan(IV)oxid



Navngivning af ionforbindelser

Hvilket salt dannes mellem Ca^{2+} og PO_4^{3-} (phosphat)?
Navngiv saltet.

fælles multiplum for at sikre at summen af ladningerne=0:

3 Ca^{2+} har ladning +6, 2 PO_4^{3-} har ladning -6

$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ Calciumphosphat

20
Ca
+2

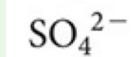
Navngiv $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$

tre SO_4^{2-} har ladning 6-

to jern må være Fe^{3+}

jern(III)sulfat

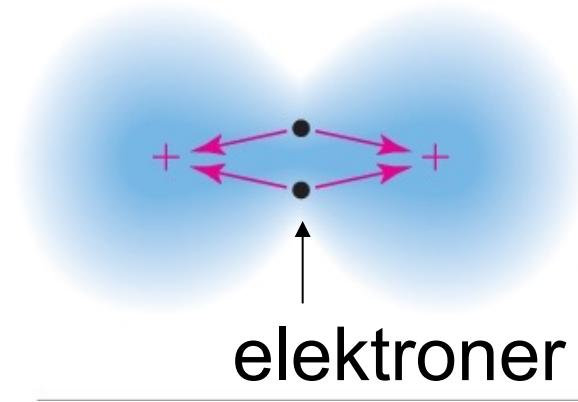
26
Fe
+3
+2



Sulfate

I en kovalent binding deler to atomer elektroner

Typisk et ikke-metal og et andet ikke-metal (eller metalloid).



2 elektroner mellem 2 atomer= en kovalent enkelbinding
tegnes ofte som streg ("Kekule struktur"):



Navngivning af kovalente forbindelser (molekyler)

Græske præfix angiver antal, *mono-* i **starten** undlades, ender igen på "–id" ("ide" engelsk).

NF_3	nitrogentrifluorid
N_2O	dinitrogenmonoxid (lattergas)
CO_2	carbondioxid

TABLE 2.6 Numerical Prefixes for Naming Compounds

Prefix	Meaning
mono-	1
di-	2
tri-	3
tetra-	4
penta-	5
hexa-	6
hepta-	7
octa-	8
nona-	9
deca-	10

OBS! Navngivning:

- **Ionforbindelser:** Ladning af kation skrives i parentes med romersk tal hvis der er flere muligheder; ingen græske præfix



anion navn entydigt; neutral (+ og – går i 0)

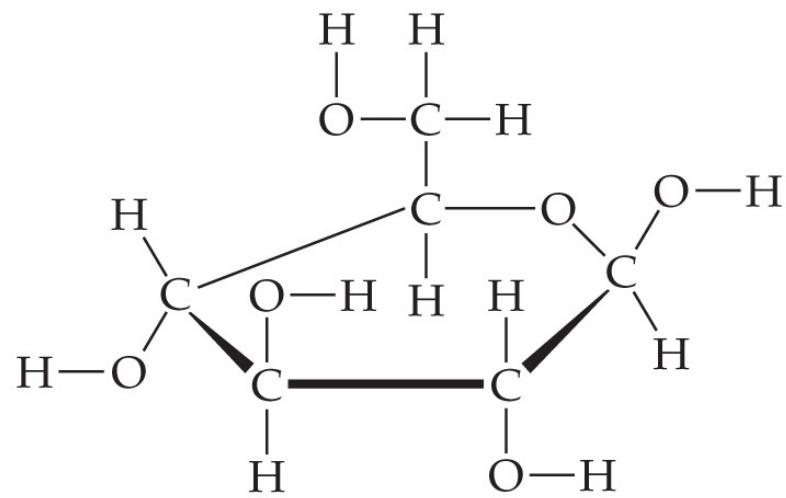
- **Kovalente forbindelser:** Græske præfix for antal atomer



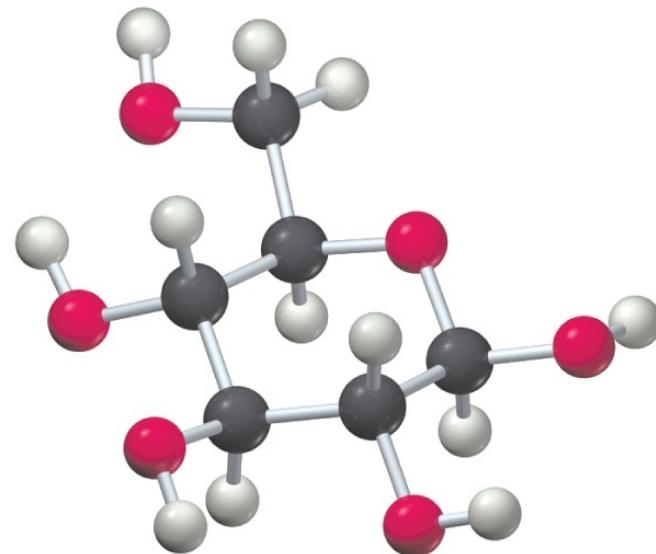
“Organiske molekyler” indeholder CH bindinger

Man skriver molekylformel for organiske molekyler:

C efterfulgt af H og andre atomer (“heteroatomer”) alfabetisk
C-H-(Br-Cl-F-N-O-P-S) med korrekt indeks

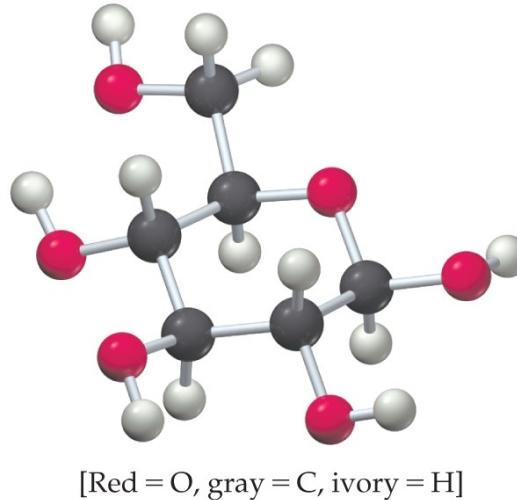
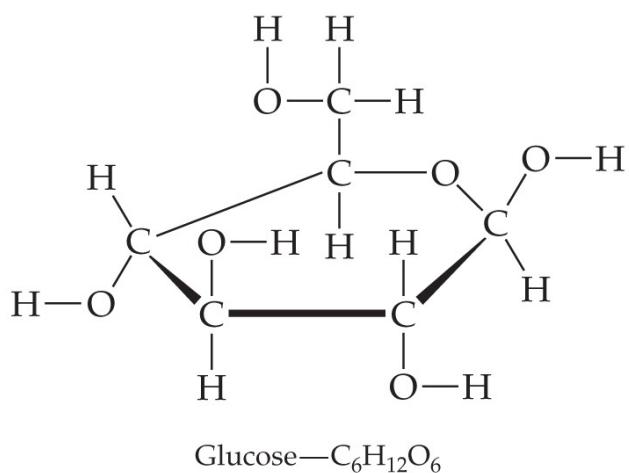


Glucose— $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$



[Red = O, gray = C, ivory = H]

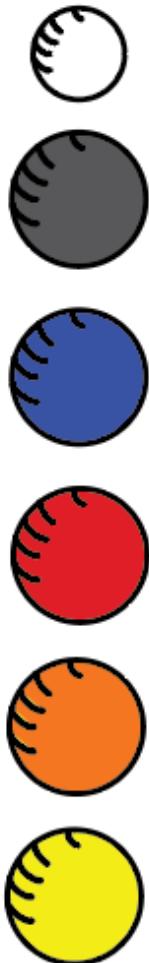
"Empirisk formel": indekserne er de mindste hele tal, der angiver forholdet mellem elementerne ("1" undlades)



For glukose er molekylformlen $C_6H_{12}O_6$ (atomer i klyngen).

Den empiriske formel er CH_2O .

Der er en farvekode ("CPK coloring")- Hvad er formlen ud fra molekylmodellen?



H

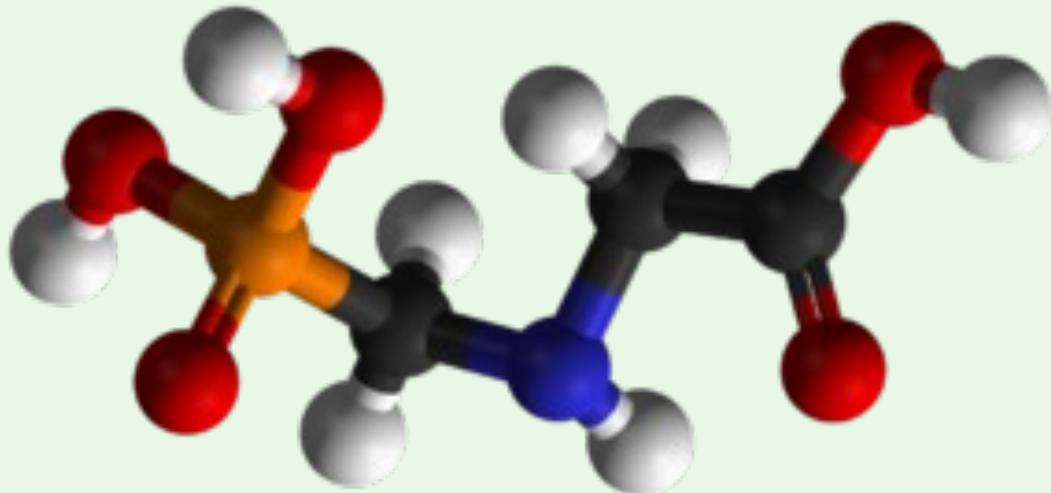
C

N

O

P

S



$\text{C}_3\text{H}_8\text{NO}_5\text{P}$

<https://play.kahoot.it/v2/?quizId=ab22f1de-3bb7-4ef9-840c-d561e09f389c>

15.00 – 17.00: Opgaveregning

B306-R96-99, 108a+b



Filippa Julie Loftheim



Rasmus Kranold Mikkelsen



Mira Svarre Nielsen



Mathilde Stenholt

26050 Kemi for Life Science

- 1 Kemisk regning, periodisk system, navngivning
- 2 Reaktioner**
- 3 Elektroner, orbitaler og periodiske trends
- 4 Bindinger
- 5 Energi
- 6 Faste stoffer og opløsninger
- 7 Reaktionskinetik
- 8 Ligevægt
- 9 Ligevægtsberegninger
- 10 Drivkraft af kemiske reaktioner
- 11 Kernekemi
- 12 Overgangsmetaller og komplekser
- 13 Organisk og biologisk kemi

A. Reaktionsligninger og støkiometriske beregninger

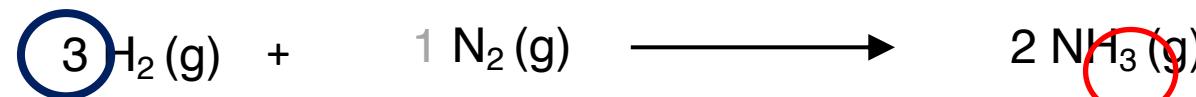
Reaktant-

Reagens- side

Substrat-



Produkt side



Hvad viser "(støkiometrisk) koefficient" og "indeks"?

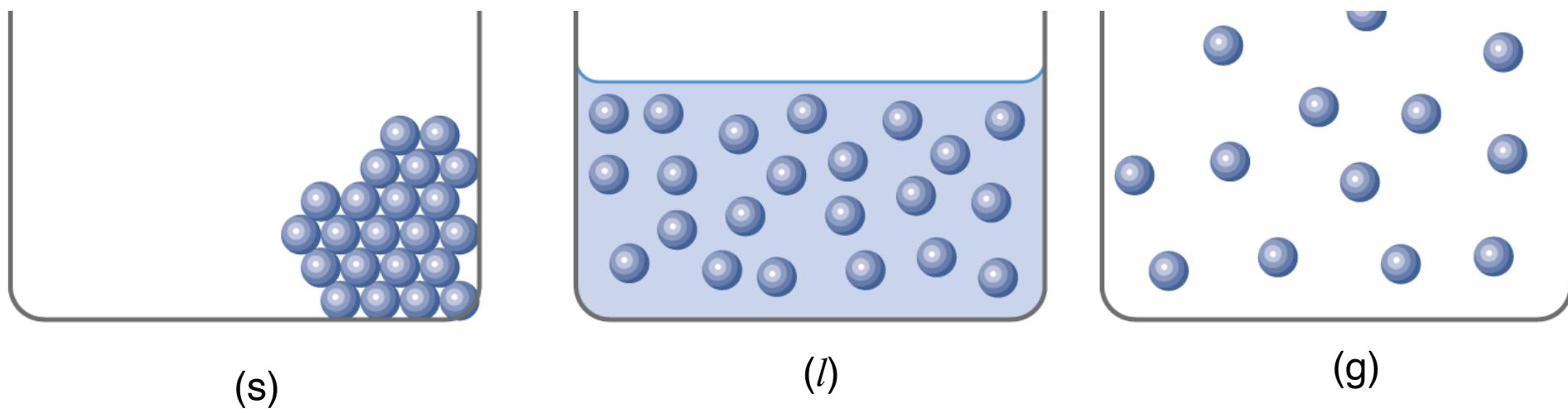
Hvad er en kemisk reaktion (hvad laves om, hvad bevares)?

Bindinger dannes og brydes (=ny elektronfordeling) .

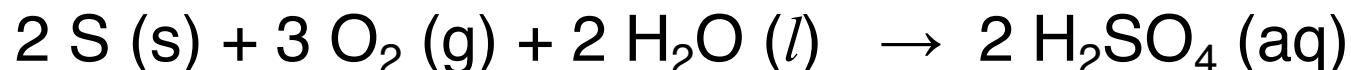
Type og antal atomer samt nettoladning er ens på begge sider.

Tilstandsformer i reaktionsligningen

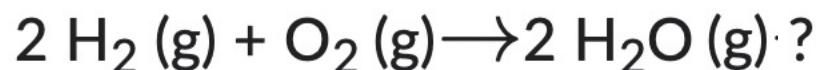
- fast stof (s): partiklerne rører hinanden men bytter ikke plads
- væskeform (*l*): bevægelige partikler der rører hinanden
- gasform (g): bevægelige partikler der ikke rører hinanden
og fylder 24,8 L/mol (ved 25 °C, 1 bar)



vandig opløsning (aq): opløst stof (eng. solute) i vand som opløsningsmiddel (eng. solvent)



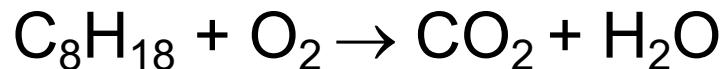
Hvilket udsagn er **forkert** for støkiometriken i reaktionen



- 2 molekyler H_2 reagerer med 1 molekyle O_2
- 2 mol H_2 reagerer med 1 mol O_2
- 2 Liter H_2 gas reagerer med 1 Liter O_2 gas
- 2 g H_2 gas reagerer med 1 g O_2 gas

Afstemning - atomtyper og antal bevares

1. Skriv den ikke afstemte reaktion



Tæl atomerne på begge sider

2. Find koefficienterne:

- Start med et atom, der er til stede i kun en forbindelse på hver side.
- Elementer, der optræder for sig selv bliver bedst ordnet til sidst (her O_2).
- Husk at gange koefficient og index

3. Tjek at der er samme antal atomer og ladninger på begge sider

4. Vi vil ikke tænke i "halve molekyler".

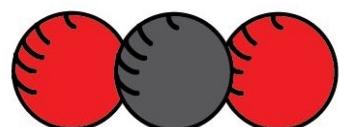
Man må gerne gange begge sider af reaktionspilen med den samme faktor (eller dividere, eller trække fra). Vi bruger de mindste heltal der giver korrekt afstemning.

Kulbrinter med formel C_nH_{2n+2} er organiske forbindelser i fossile brændstoffer og betegnes som Alkaner.

TABLE 2.6 Numerical Prefixes for Naming Compounds

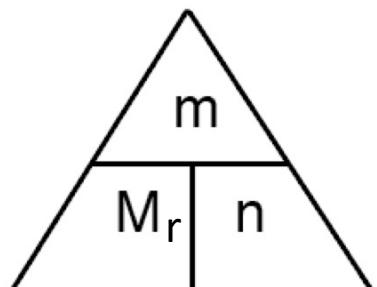
Prefix	Meaning		
mono-	1	CH_4	methan
di-	2	C_2H_6	ethan
tri-	3	C_3H_8	propan
tetra-	4	C_4H_{10}	butan
penta-	5	C_5H_{12}	pentan
hexa-	6	C_6H_{14}	hexan
hepta-	7	...	
octa-	8	C_8H_{18}	oktan
nona-	9	...	
deca-	10		

Molar masse (=molmasse) for et molekyle er summen af atom-masserne, der kan findes i det periodiske system



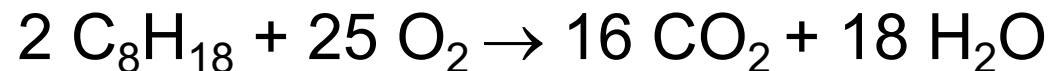
1C	12,0 g/mol
2O	$+ 2 \times 16,0 \text{ g/mol}$
<hr/>	
CO ₂	44,0 g/mol

$$\begin{aligned} M_r(\text{C}_8\text{H}_{18}) &= 8 \cdot M_r(\text{C}) + 18 \cdot M_r(\text{H}) \\ (8 \cdot 12 + 18 \cdot 1) \text{ g/mol} &\approx 114 \text{ g/mol} \end{aligned}$$



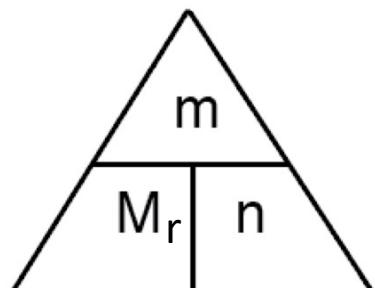
Kvantitativ masse-mol omregning i en afstemt reaktion

Hvilken masse O₂ omdannes fuldstændig med en given masse oktan; hvor meget af hvert produkt dannes?



Grams of
C₈H₁₈

/Molar mass
of C₈H₁₈



Hvor mange gram O₂ (M_r=32 g/mol) forbruges i forbrænding af 1 kg oktan (C₈H₁₈; M_r=114 g/mol)?



A= kendt (her masse oktan); B=ukendt (her masse O₂)

$$\text{masse A} \times \frac{1}{\text{molmasse A}} \times \frac{\text{Koefficient til B}}{\text{Koefficient til A}} \times \text{molmasse B} = \text{masse B}$$

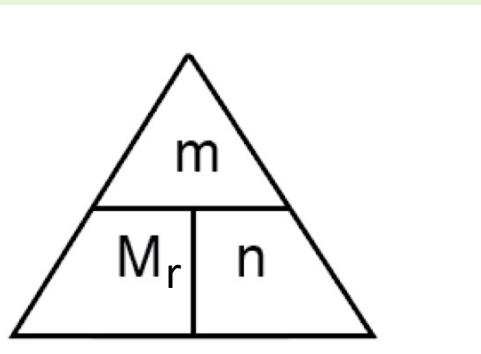
m(kendt)

n(kendt)

n(søgt)

m(søgt)

$$1000 \text{ g} / (114 \text{ g/mol}) \times \frac{25}{2} \times 32 \text{ g/mol} = 3510 \text{ g}$$

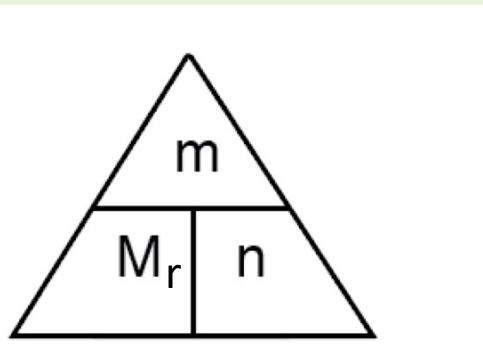


Hvor mange gram CO₂ (M_r = 44 g/mol) frigives i forbrænding af 1 kg oktan (C₈H₁₈; M = 114 g/mol)?



$$\text{masse A} \times \frac{1}{\text{molmasse A}} \times \frac{\text{Koefficient til B}}{\text{Koefficient til A}} \times \text{molmasse B} = \text{masse B}$$

$$1000 \text{ g} / (114 \text{ g/mol}) \times \frac{16}{2} \times 44 \text{ g/mol} = 3087 \text{ g}$$



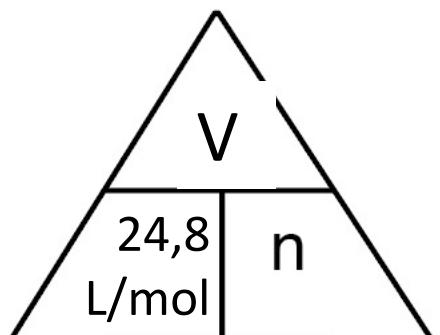
Hvis volumen er søgt: erstat "masse" med "volumen" og "molmasse" med "molar volumen" for B

$$\text{masse A} \times \frac{1}{\text{molmasse A}} \times \frac{\text{Koefficient til B}}{\text{Koefficient til A}} \times \text{molmasse B} = \text{masse B}$$

n(søgt)

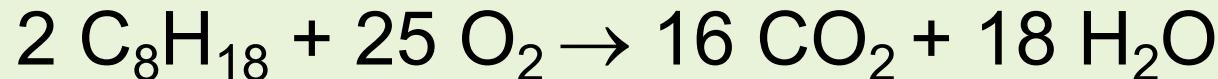
$$\text{masse A} \times \frac{1}{\text{molmasse A}} \times \frac{\text{Koefficient til B}}{\text{Koefficient til A}} \times \text{molar volumen B} = \text{volumen B}$$

Hvilket **volumen** O₂ bruges i forbrænding af 1000 g oktan?



$$1000 \text{ g}/(114 \text{ g/mol}) \times$$

Hvilket **volumen** CO₂ frigives i forbrænding af 692 g oktan?



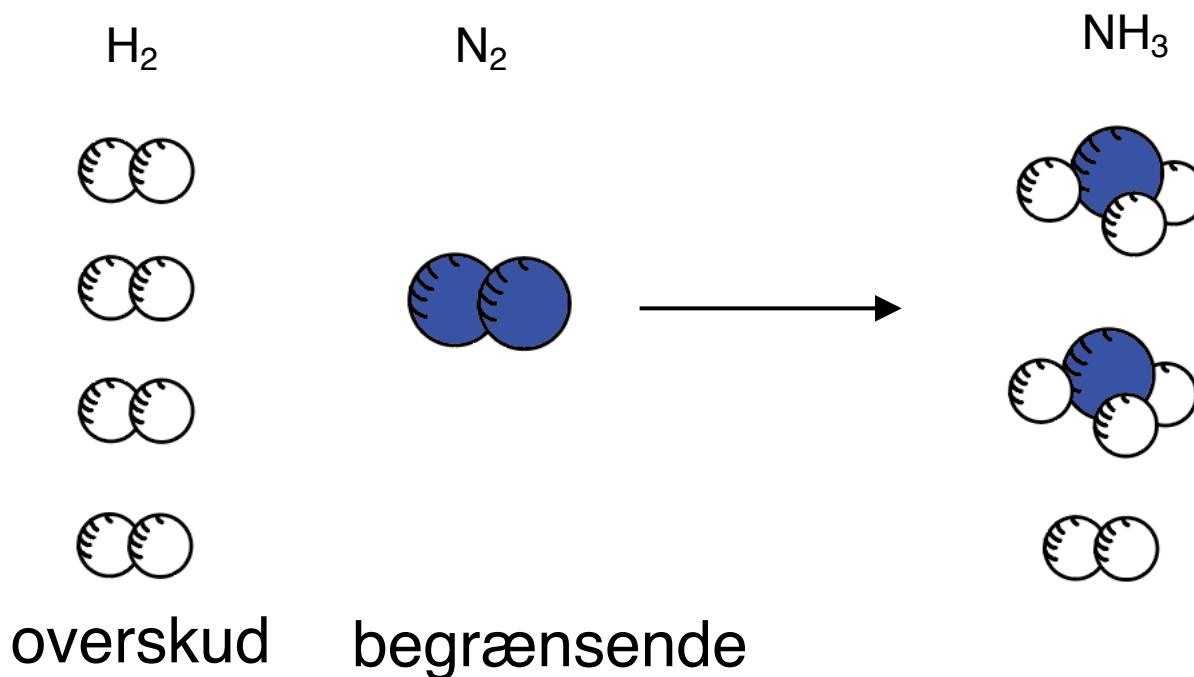
masse A/(molmasse A) × $\frac{\text{Koefficient til } B}{\text{Koefficient til } A}$ × **molar volumen B** = **volumen B**

$$692 \text{ g} / (114 \text{ g/mol}) \times \frac{16}{2} \times 24,8 \text{ L/mol} = 1204 \text{ L}$$

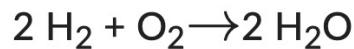
Reaktioner med begrænsende reaktant:

Den "begrænsende reaktant" er til stede i en begrænsende mængde (kan lave mindst produkt).

Enhver af de andre reaktanter er "i overskud".



Reaktionen



bliver gennemført med 10 mol H_2 og 7 mol O_2 . Hvad er den begrænsende reaktant, og hvor meget H_2O dannes der?

- H_2 er begrænsende, 5 mol H_2O dannes
- H_2 er begrænsende, 10 mol H_2O dannes
- O_2 er begrænsende, 10 mol H_2O dannes
- O_2 er begrænsende, 5 mol H_2O dannes

10 mol H_2 kan danne 10 mol H_2O

7 mol O_2 kan danne 14 mol H_2O

H_2 er begrænsende fordi den kan danne mindst produkt. Der kan dannes 10 mol H_2O .

10 mol H_2 og 5 mol O_2 bliver til 10 mol H_2O . 2 mol O_2 er i overskud.

Den begrænsende reaktant bestemmer det maksimale teoretiske udbytte.

Hvis man reelt får mindre produkt er % udbytte under 100%

$$\% \text{ udbytte} = \frac{\text{reelt udbytte}}{\text{teoretisk maksimumudbytte}} \times 100\% = \frac{27 \text{ mol}}{30 \text{ mol}} \times 100\% = 90\%$$

“Grøn kemi/grøn bioteknologi” er at

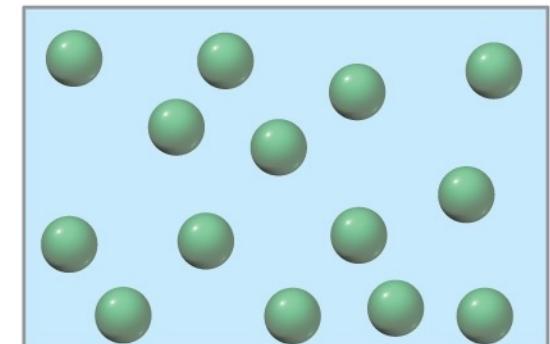
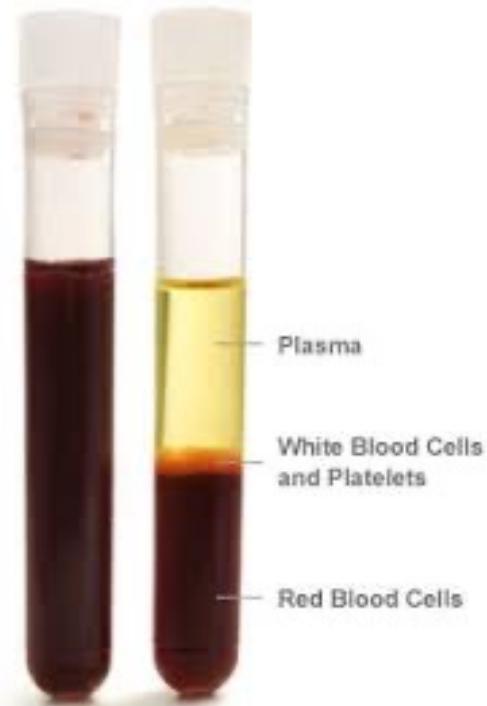
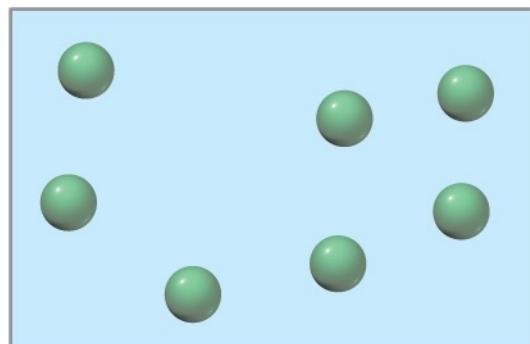
- undgå affaldsprodukter (høj % udbytte)
- bruge fornybare reaktanter
- sikre at produktet er nedbrydeligt efter brug eller kan genbruges



B. Koncentrationsmål og reaktioner i vandig opløsning

En opløsning er en klar og transparent blanding af opløsningsmiddel og opløst stof.

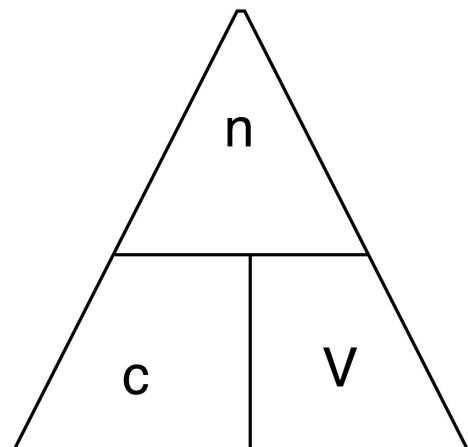
Partiklerne er fordelt jævnt og hver del ser ens ud.



Molaritet er et koncentrationsmål for en opløsning

Molaritet (c, ofte bare "koncentration"): Antallet af mol stof oplost i hver liter opløsning.

Enhed mol/L som betegnes som "**molar**" og kan skrives som 1 M = 1 mol/L (f eks. 1 μ M=10⁻⁶ mol/L)



Masse der skal bruges for at opnå koncentration c i volumen V:

$$m = n \times M_r = c \times V \times M_r$$

Hvilken masse glukose ($C_6H_{12}O_6$, $M_r=180$ g/mol) skal bruges til 1,5 liter oplosning med koncentration 0,25 M?

$$m = c \times V \times M_r$$

$$m = 0,25 \frac{mol}{L} \times 1,5 L \times 180 \frac{g}{mol} = 67,5 \text{ g glukose}$$

4. Vægtning 2%:

Koffein har molarmasse $M_r=194,2$ g/mol. Filterkaffe indeholder cirka 3,5 mM koffein. Hvor mange gram koffein er der i en liter filterkaffe?

Hvilken molaritet har rent vand?

($m=1000$ g; $V=1$ L; $M_r=18$ g/mol)?

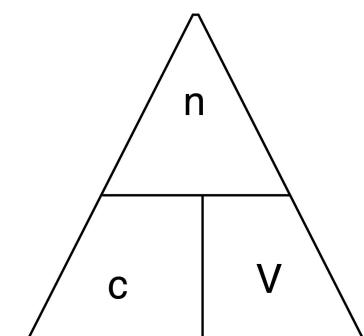
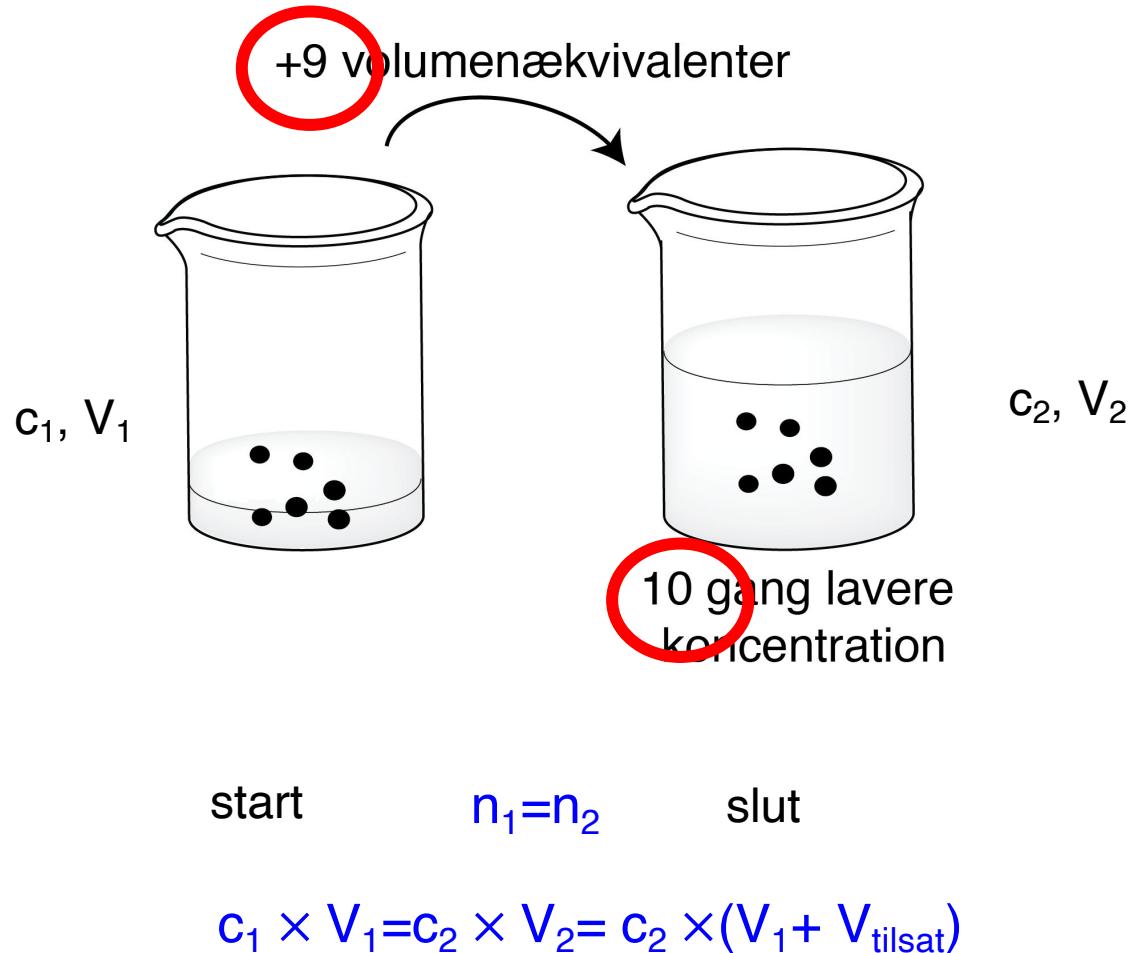
$$m = c \times V \times M_r$$

$$c = m/(V \times M_r) = 1000 \text{ g}/(1 \text{ L} \times 18 \text{ g/mol}) = 55,56 \text{ mol/L}$$

Fortynding af koncentreret opløsning med solvent:

mol opløst stof er konstant (• i figuren),
volumenet af opløsningen og molaritet forandres

Du har 100 mL af 1 M opløsning som skal fortyndes til 0,1 M.
Hvordan gør du?



Du tilføjer 20 mL af en 0,400 M glukoseopløsning til en 80 ml cellekultur uden glukose.

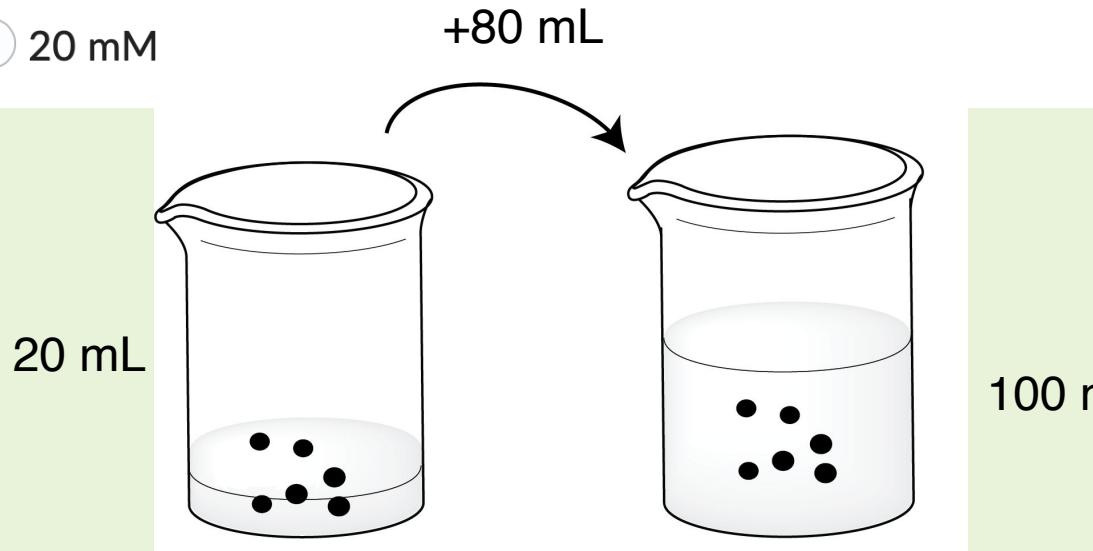
Hvad er glukosekoncentrationen i den resulterende blanding?

80 mM

40 mM

100 mM

20 mM



Fem gange lavere koncentration

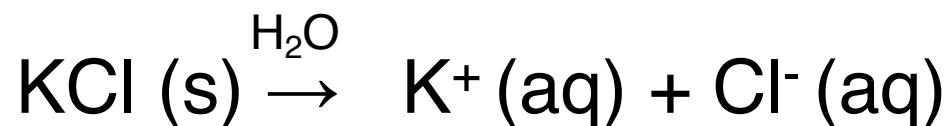
$$c_1 \times V_1 = c_2 \times V_2$$

V_2 er 100 mL, ikke 80 mL

Hvad er det oploste stof?

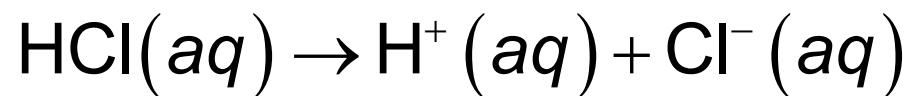
Ikke-elektrolytter: Stoffer, der ikke producerer ioner i vandige oplosninger; f eks glukose

Elektrolytter: Stoffer, der oploses til vandige, elektrisk ledende oplosninger af ioner

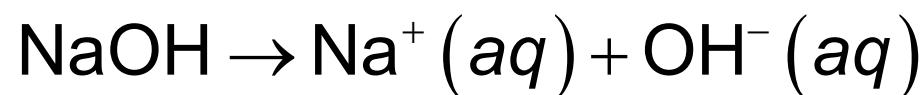


Syrer, baser, og neutraliseringsreaktioner

Syre (Arrhenius): En substans der laver H^+ (H_3O^+) ioner i vand



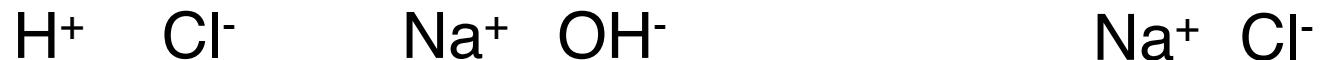
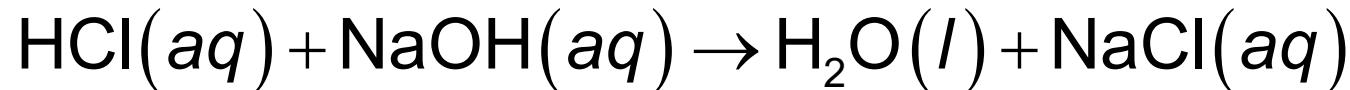
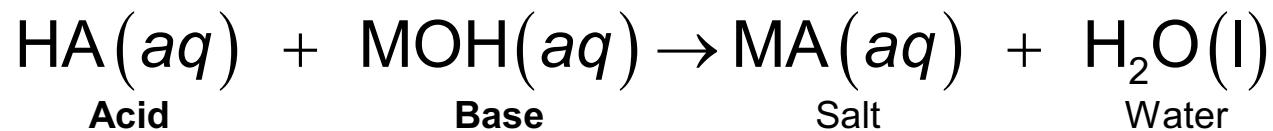
Base (Arrhenius): En substans der laver hydroxyioner OH^- i vandig opløsning



I en sur opløsning er der mere H^+ end OH^- .

I en basisk opløsning er der mere OH^- end H^+ .

1. Syre-base-neutraliseringsreaktioner: en syre reagerer med en base til en ionforbindelse (salt)

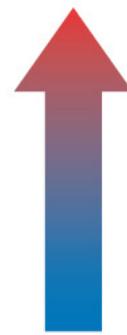


Kation fra base Anion fra syre

Relevant i spildevandsrensning, ...

Stærke syrer og baser danner mange ioner i vandig oplosning

Strong acid



Sulfuric acid



Hydrochloric acid



Nitric acid



Phosphoric acid



Hydrofluoric acid

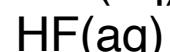
Weak acid



Acetic acid



hydrogenkloridsyre (saltsyre)



hydrogenfluoridsyre (flussyre)



Potassium hydroxide



Sodium hydroxide

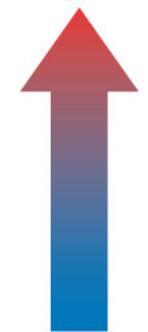


Barium hydroxide



Calcium hydroxide

Strong base



Ammonia

Weak base

Oxo-syrer indeholder H, O og et andet atom.

Vi har mødt anionerne efter H⁺ er frigivet



kulsyre



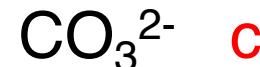
sovlsyre



salpetersyre



phosphorsyre



carbonat



sulfat



nitrat



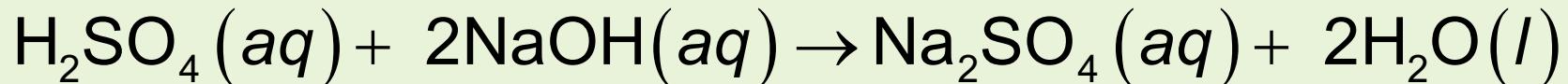
phosphat

En **syre** der kan afgive 1 H⁺ betegnes som en **monoprot** eller **monovalent syre** (f eks salpetersyre).

En **syre** der kan afgive 2 H⁺ betegnes som en **diprot** eller **divalent syre** (f eks sovlsyre).

En **syre** der kan afgive 3 H⁺ betegnes som en **triprot** eller **trivalent syre** (f eks phosphorsyre).

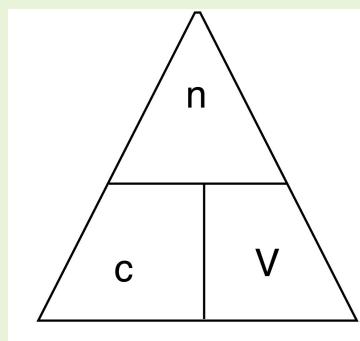
Hvilket volumen 0,1 M NaOH opløsning skal bruges til at neutralisere 0,25 L af 0,5 M H₂SO₄?
 (brug c og V til beregningen af stofmængde)



Molforhold mellem
 H₂SO₄ og NaOH
 (1:2)

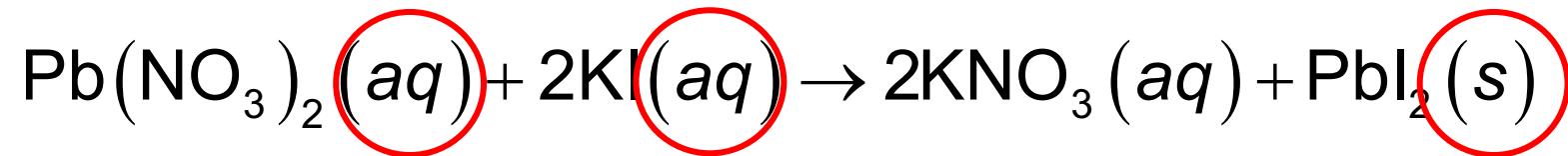
$$\frac{0,5 \text{ mol H}_2\text{SO}_4}{1 \text{ L H}_2\text{SO}_4} \times 0,25 \text{ L H}_2\text{SO}_4 \quad (0,125 \text{ mol H}_2\text{SO}_4)$$

$$\times \frac{2 \text{ mol NaOH}}{1 \text{ mol H}_2\text{SO}_4} \quad (0,25 \text{ mol NaOH})$$



$$V = n/c = 0,25 \text{ mol NaOH} / (0,1 \text{ mol/L}) = 2,5 \text{ L NaOH}$$

2. Fældningsreaktioner: opløselige reaktanter giver et uopløseligt fast produkt, der udfælder fra opløsningen



Proteiner og DNA oprenses tit ved udfældning

Den mest almindelige metode til fjernelse af kationer fra opløsning (f. eks. tungmetaller) er at udfælde dem som metalhydroxid

Cr, As, Cd, Hg og Pb har det største potentiiale for at forårsage skade; derudover Ni, Cu, Se, Sn, m.m.

1 H hydrogen 1.0079	2 He helium 4.0026
3 Li lithium 6.941	4 Be beryllium 9.01218
11 Na sodium 22.9898	12 Mg magnesium 24.3050
19 K potassium 39.0983	20 Ca calcium 40.078
37 Rb rubidium 85.4678	38 Sr strontium 87.62
55 Cs cesium 132.905	56 Ba barium 127.327
87 Fr francium (223)	88 Ra radium (226)
103 Lr lutetium (262)	104 Rf rutherfordium (267)
105 Db dubnium (268)	106 Sg samarium (271)
107 Bh bohrium (272)	108 Hs hafnium (270)
109 Mt mendelevium (276)	110 Ds darmstadtium (281)
111 Rg roentgenium (285)	112 Cn copernicium (280)
113 Nh nihonium (284)	114 Fl flerovium (289)
115 Mc moscovium (288)	116 Lv livensium (293)
117 Ts tennessine (294)	118 Og oganesson (294)

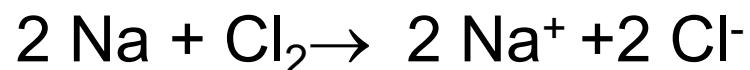
Hvordan fjerner man uønskede metalioner fra opløsningen med fældning?

Opløselige forbindelser	Undtagelser
Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+ (alkali-kationer)	
NH_4^+ (ammonium ion)	ingen undtagelse
NO_3^- (nitrat)	
CH_3CO_2^- (acetat)	
SO_4^{2-} (sulfat)	salte med Sr^{2+} , Ba^{2+} , Hg_2^{2+} , Pb^{2+}
Ikke opløselige forbindelser	Undtagelser
CO_3^{2-} (carbonat)	salte med alkali-kationer, NH_4^+
PO_4^{3-} (fosfat)	
OH^- (hydroxide)	Salte med alkali-kationer, NH_4^+ , nogle jordalkali-kationer

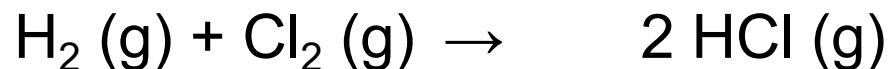
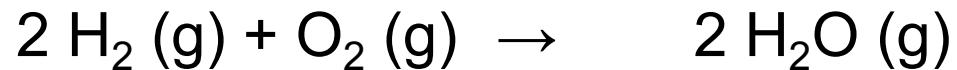
- Kan Na^+ nemt fjernes fra havvand ved udfældning?
- Er godtningsmiddel NH_4NO_3 vandopløselig?
ca 3 kg/L (40 °C)
- Barium ionen er giftig for os. Hvorfor kan barium sulfat alligevel bruges som klinisk kontrastmiddel?

3. Oxidations-reduktion (Redox)-reaktioner:

En eller flere elektroner overføres mellem reaktionspartnere (atomer, molekyler eller ioner)

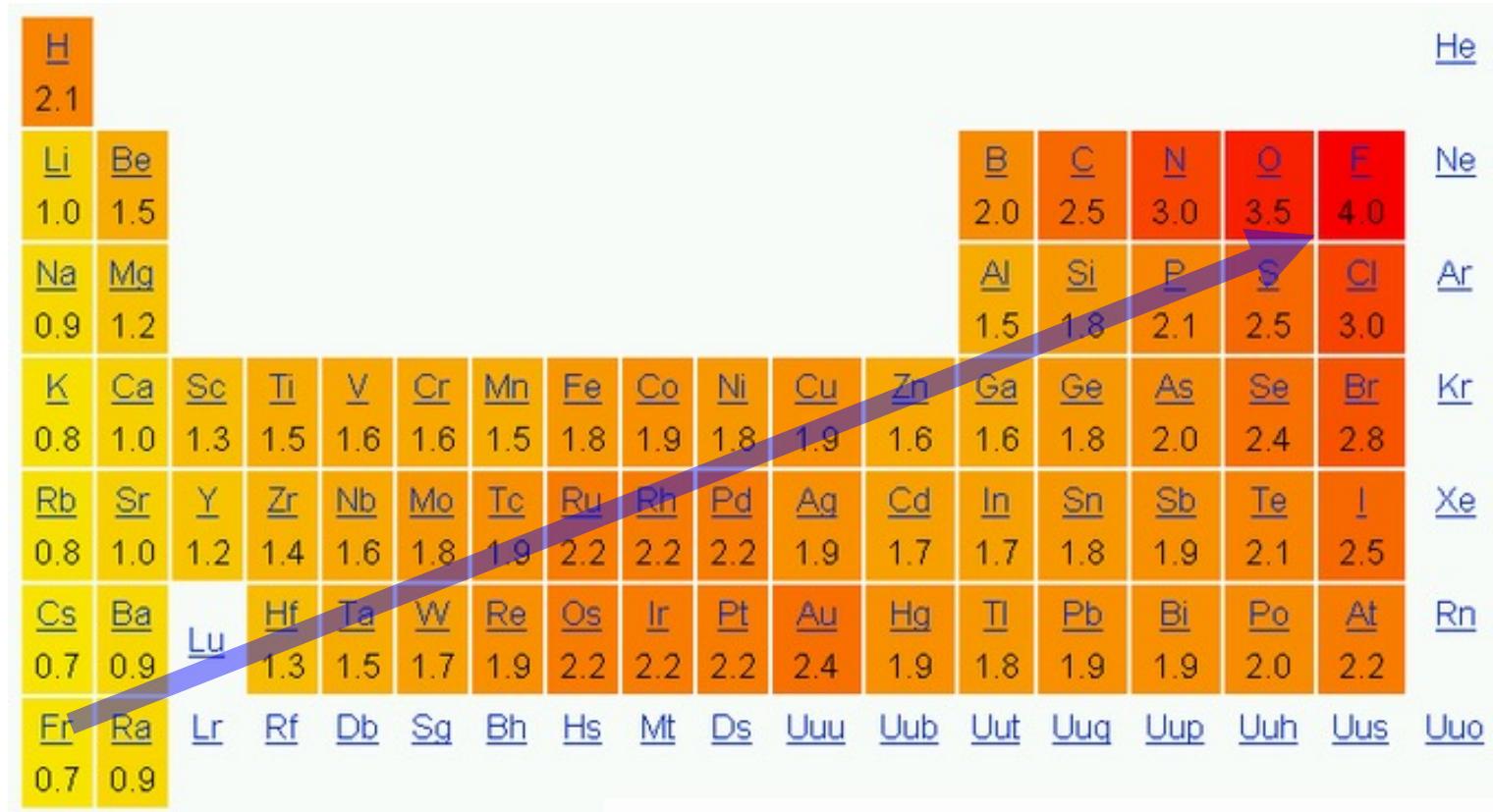


Na har mistet en elektron, Cl har optaget en elektron

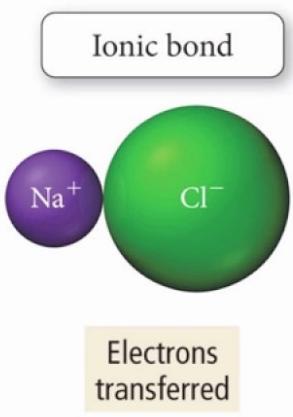
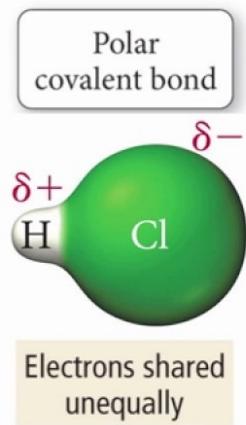
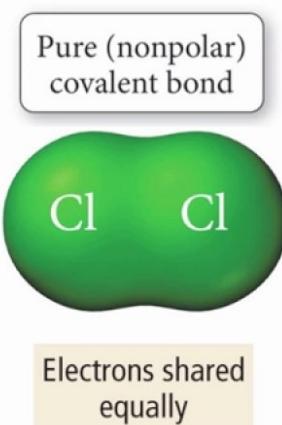


her overføres elektroner fra H delvist til O eller Cl der tiltrækker elektroner mere end H

Hvor meget tiltrækker et grundstof elektroner: Elektronegativitet



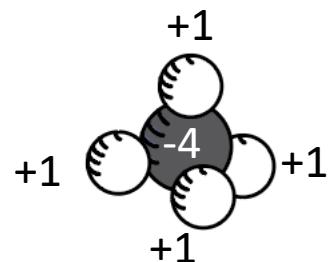
Bond Type	Electronegativity Difference
pure covalent	< 0.4
polar covalent	between 0.4 and 1.8
ionic	> 1.8



C. Redoxreaktioner og oxidationstal

Oxidationstallet bliver brugt til at holde styr på elektronoverførsler i kemiske reaktioner

Oxidationstal defineres som den ladning – positiv eller negativ – et atom ville have, hvis forbindelsen blev sammenholdt ved ionbinding.

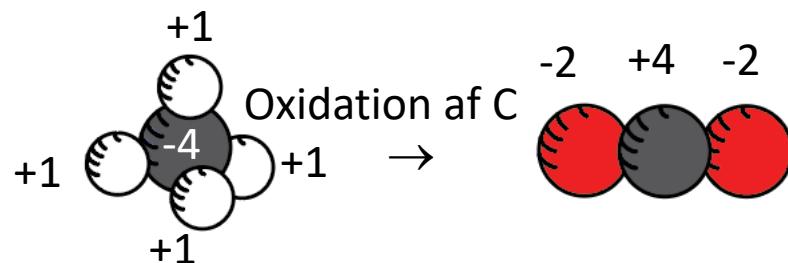


C tiltrækker elektronerr
mere end H

H	2.1					He
Li	1.0	Be	1.5			
Na	0.9	Mg	1.2			
B	2.0	C	2.5	N	3.0	O
Al	1.5	Si	1.8	P	2.1	S
					Cl	3.0
						Ar

Et tab af elektroner, reaktion med oxygen eller tab af hydrogen kaldes for **oxidation**. Her stiger oxidationstallet.

En optagelse af elektroner, reaktion med hydrogen eller tab af oxygen kaldes for **reduktion**. Her falder oxidationstallet.



C tiltrækker elektronerne
mere end H

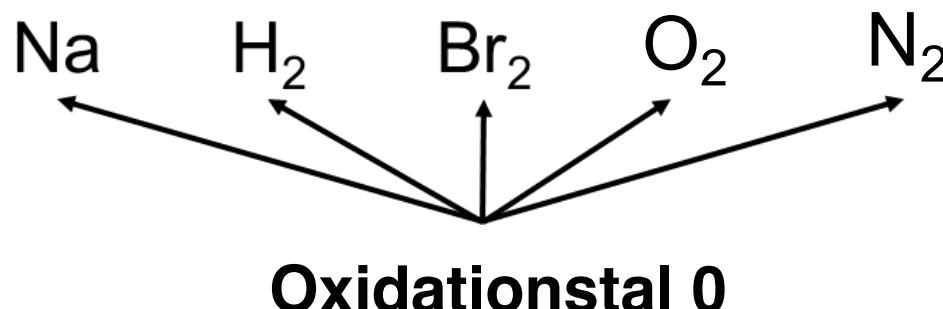
O tiltrækker elektronerne
mere end C

I **redoxreaktioner** sker en ændring i oxidationstal

Regler for bestemmelse af et atoms oxidationstal (en regel højere oppe på listen er vigtigere end dem nedenfor)

1. Summen af oxidationstal for alle atomer skal være lig atomets eller molekylets ladning.

Grundstofatomer alene eller i molekyler af rent grundstof (f.eks. H_2) har oxidationstal 0.



Na^+	Ca^{2+}	Al^{3+}	Cl^-	O^{2-}
+1	+2	+3	-1	-2

Alkalimetaller i forbindelser +1

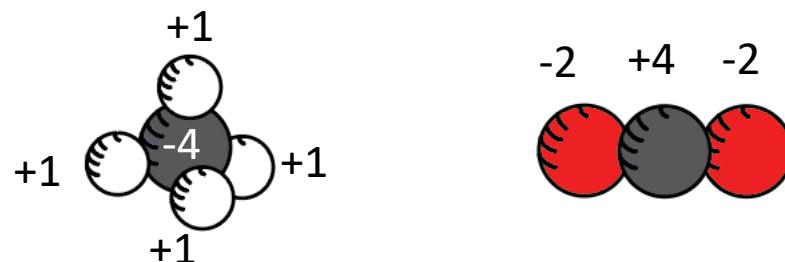
Jordalkalimetaller i forbindelser +2

Regler for bestemmelse af et atoms oxidationstal

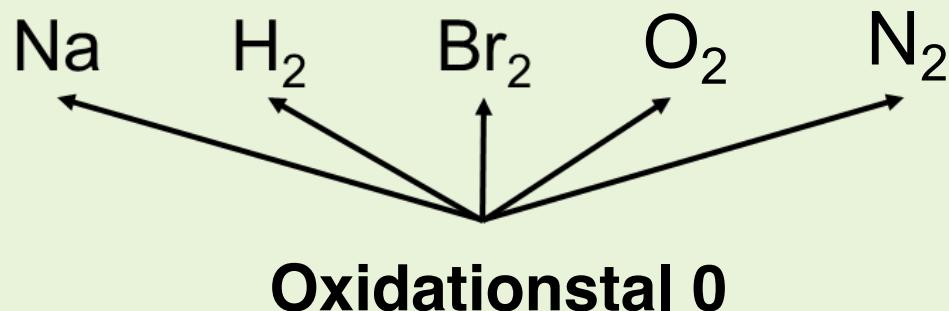
2. Oxidationstal for F er -1 i forbindelser (ikke F_2 , se regel 1).
3. H har oxidationstal +1.
4. O har oxidationstal -2.
5. Ellers tildeles elektronerne det mere elektronegative grundstof.

Brøkdele er mulige.

Bindinger mellem identiske grundstoffer deler elektronerne.



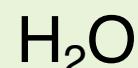
Summen af oxidationstal skal være lig molekylets ladning.



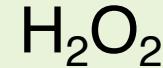
H har oxidationstal +1.

O har oxidationstal -2.

+1 -2



+1 -1



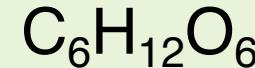
+1 +5 -2



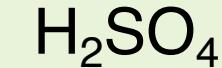
-3 +1



0 +1 -2



+1 +6 -2



$$2^*(+1) + 1^*(-2) = 0$$

Tag højde for indeks

$$1^*(+1) + ? + 3^*(-2) = 0$$

$$?=5$$

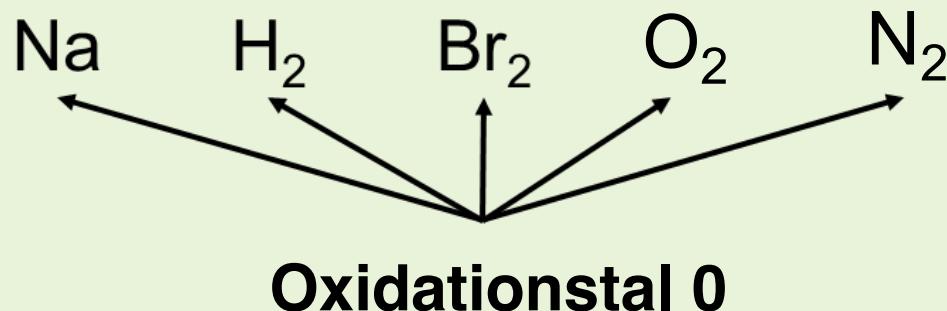
$$2^*(+1) + ? + 4^*(-2) = 0$$

$$?=6$$

$$6^*? + 12^*(+1) + 6^*(-2) = 0$$

$$?=0$$

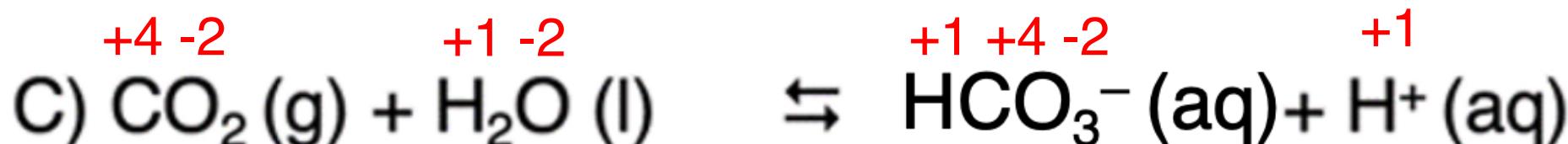
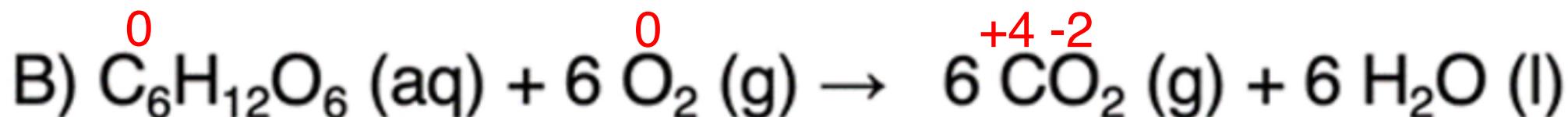
Summen af oxidationstal skal være lig molekylets ladning.



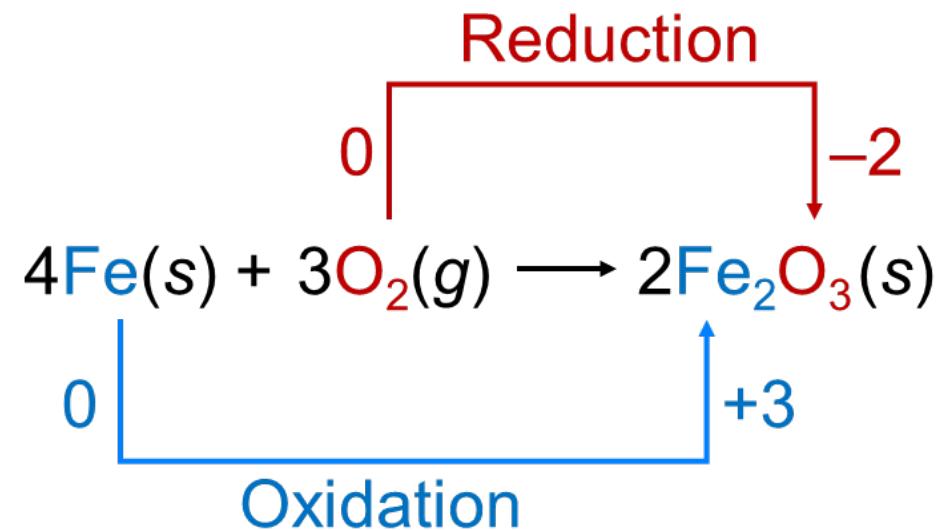
H har oxidationstal +1.

O har oxidationstal -2.

Identifier alle redoxreaktioner blandt disse tre reaktioner:



Et Oxidationsmiddel udløser oxidation i en anden reaktant og bliver selv reduceret



Et Reduktionsmiddel udløser reduktion i en anden reaktant og bliver selv oxideret

Oxidationsmidler har typisk grundstoffer i høje oxidationstal

+7 +6 +6 +8
(f.eks. MnO_4^- , CrO_3 , $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$, OsO_4)

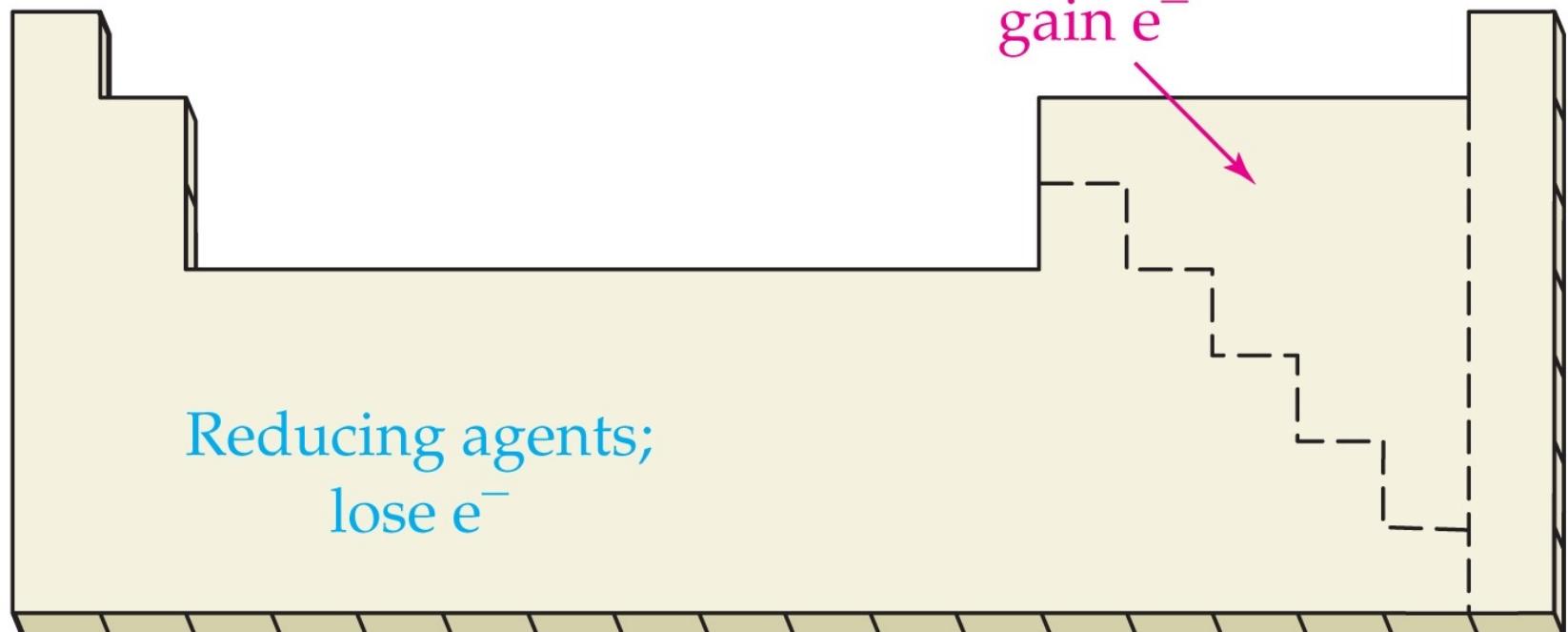
eller meget elektronegative elementer
(O_2 , F_2 , Cl_2 , Br_2)

Oxidizing agents;
gain e^-

gain e^-



Reducing agents;
lose e^-

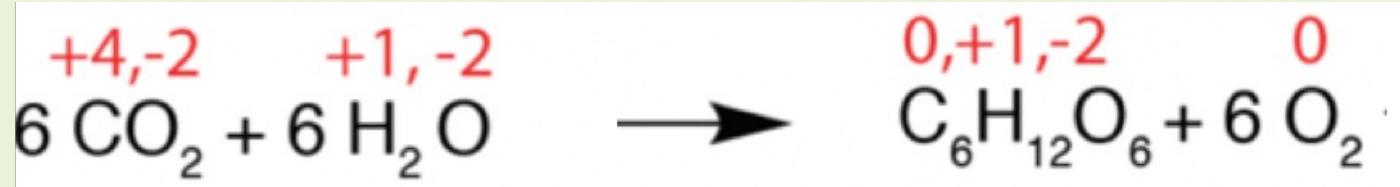


Metaller der gerne afgiver elektroner (øverst i rækken) er gode **reduktionsmidler**

Oxidation Reaction	
Strongly reducing	<p>These elements react rapidly with aqueous H^+ ions (acid) or with liquid H_2O to release H_2 gas.</p>
	<p>These elements react with aqueous H^+ ions or with steam to release H_2 gas.</p>
	<p>These elements react with aqueous H^+ ions to release H_2 gas.</p>
Weakly reducing	<p>These elements do not react with aqueous H^+ ions to release H_2.</p> <p>$\text{H}_2 \rightarrow 2 \text{H}^+ + 2 e^-$</p> <p>Li $\rightarrow \text{Li}^+ + e^-$ K $\rightarrow \text{K}^+ + e^-$ Ba $\rightarrow \text{Ba}^{2+} + 2 e^-$ Ca $\rightarrow \text{Ca}^{2+} + 2 e^-$ Na $\rightarrow \text{Na}^+ + e^-$</p> <p>Mg $\rightarrow \text{Mg}^{2+} + 2 e^-$ Al $\rightarrow \text{Al}^{3+} + 3 e^-$ Mn $\rightarrow \text{Mn}^{2+} + 2 e^-$ Zn $\rightarrow \text{Zn}^{2+} + 2 e^-$ Cr $\rightarrow \text{Cr}^{3+} + 3 e^-$ Fe $\rightarrow \text{Fe}^{2+} + 2 e^-$</p> <p>Co $\rightarrow \text{Co}^{2+} + 2 e^-$ Ni $\rightarrow \text{Ni}^{2+} + 2 e^-$ Sn $\rightarrow \text{Sn}^{2+} + 2 e^-$</p> <p>Cu $\rightarrow \text{Cu}^{2+} + 2 e^-$ Ag $\rightarrow \text{Ag}^+ + e^-$ Hg $\rightarrow \text{Hg}^{2+} + 2 e^-$ Pt $\rightarrow \text{Pt}^{2+} + 2 e^-$ Au $\rightarrow \text{Au}^{3+} + 3 e^-$</p>

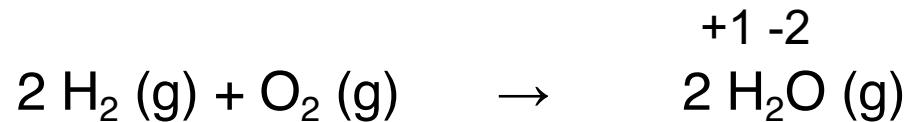
Stoffer nederst i rækken omtales som "ædle": de bliver ikke let oxideret og man finder dem i ren, metallisk form i naturen

Hvilket atom bliver oxideret i fotosyntesen?



O bliver oxideret; fra -2 til 0 er en stigning i oxidationstal

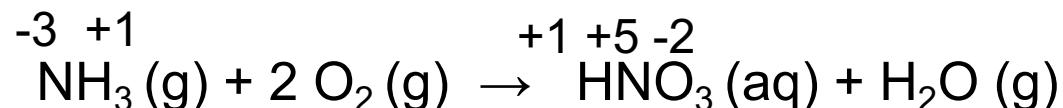
Appendix: Eksempler på meget vigtige reaktioner



H₂ som "grønt" brændstof idet forbrændingsproduktet er vand
(lastbiler, flyvemaskiner osv)



Haber-Bosch processen producerer omkring 454 millioner tons
nitrogenbaseret gødning om året til føde for en tredjedel af jordens
befolkning

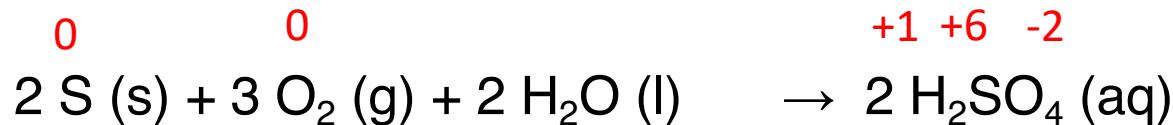


Ostwaldproces; i kombination med Haber-Bosch:



OBS: $2 \text{ NH}_4\text{NO}_3 \text{ (s)} \rightarrow 2 \text{ N}_2 \text{ (g)} + \text{O}_2 \text{ (g)} + 4 \text{ H}_2\text{O (g)}$ eksplorationsrisiko for gødning

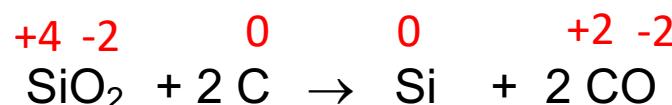
Eksempler på meget vigtige reaktioner



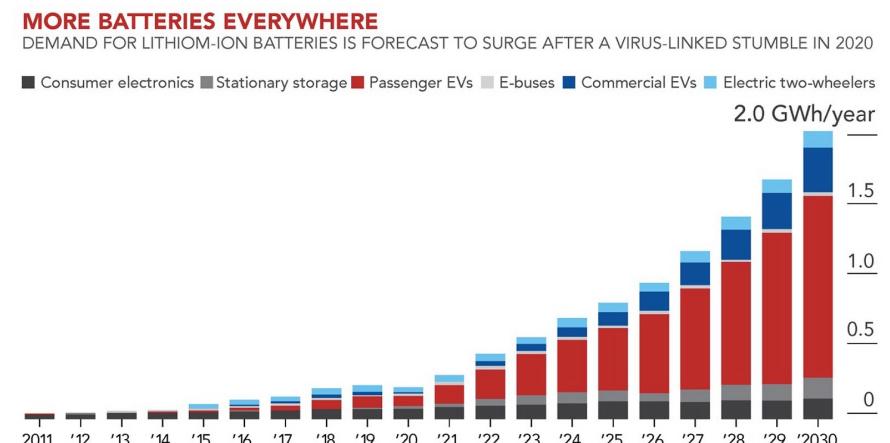
H_2SO_4 er det vigtigste industrikemikalie i verden. Sur regn.

Redoxreaktioner med Li og CoO_2

Li-Ion batteri; Li afgiver elektron til Co under afladning

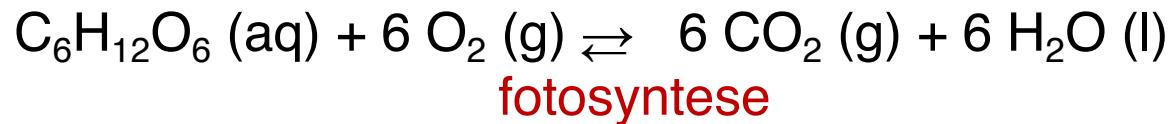


Hvis vi følger nomenklaturen fra stenalder til bronzealder og jernalder, så er vi i siliciumalderen

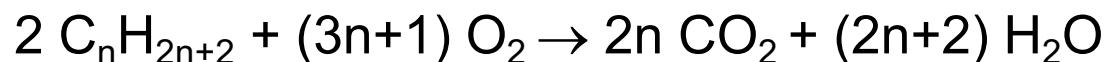


Eksempler på meget vigtige reaktioner

aerob stofskifte

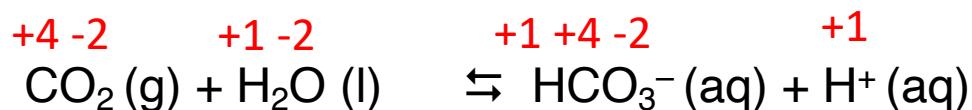


0 -2 -2

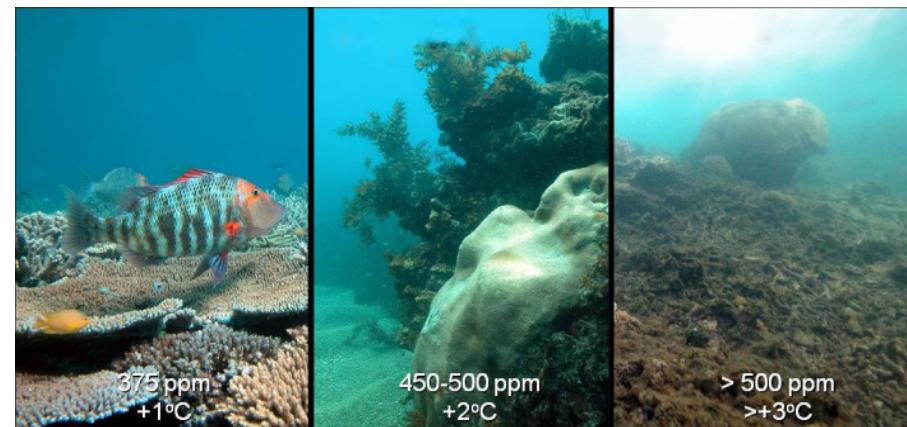


Forbrænding af kulbrinte (f eks methan, propan, benzin)

*Den eneste ikke redox-reaktion blandt disse
vigtige reaktioner:*



Med stigende CO₂-niveau i atmosfæren
forsures havet.



26050 Kemi for Life Science

- 1 Materie etc: Elektronskyer omkring kernen
- 2 Reaktionsligninger: Omfordeling af elektronerne
- 3 Elektroner, orbitaler og periodiske trends**
- 4 Bindinger
- 5 Energi
- 6 Faste stoffer og opløsninger
- 7 Reaktionskinetik
- 8 Ligevægt
- 9 Ligevægtsberegninger
- 10 Drivkraft af kemiske reaktioner
- 11 Kernekemi
- 12 Overgangsmetaller og komplekser
- 13 Organisk og biologisk kemi

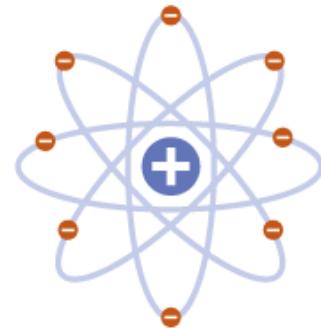
A. Kvantemekanisk atommodel og orbitaler

Atomkernen er lille og massiv.

Der er lige så mange elektroner (med negativ ladning) som der er protoner (med positiv ladning) i det neutrale atom

Men hvordan er elektronerne fordelt omkring kernen?

NUCLEAR MODEL



ERNEST RUTHERFORD



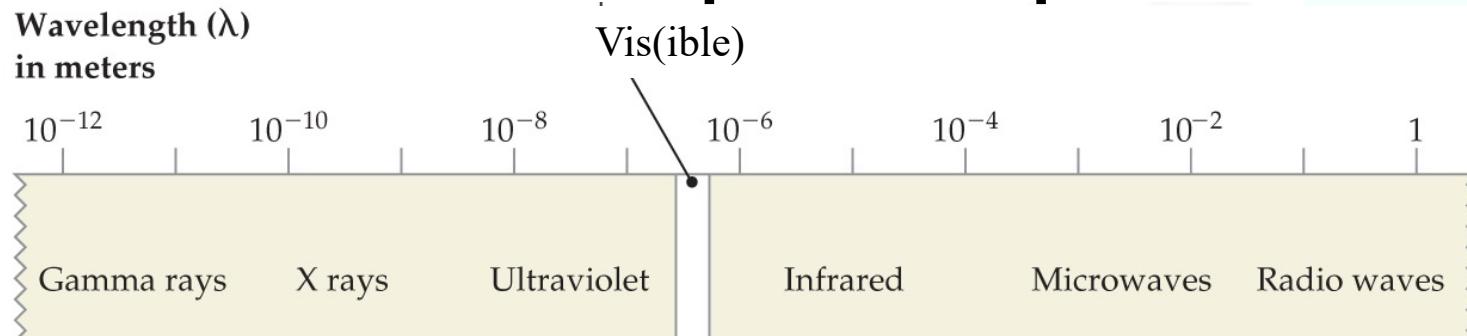
1911

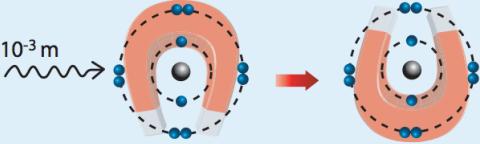
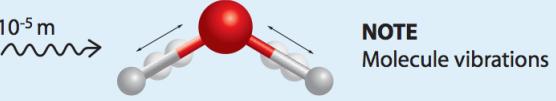
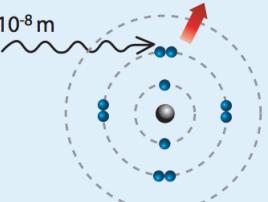


2022

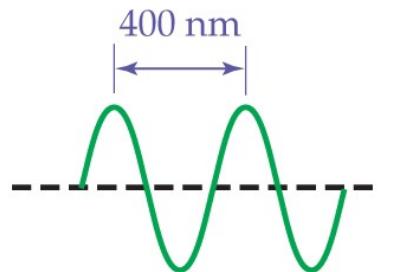
form og funktion af
lægemidler, ...

Små partikler såsom atomer kan undersøges med lys - vi taler om spektroskopi

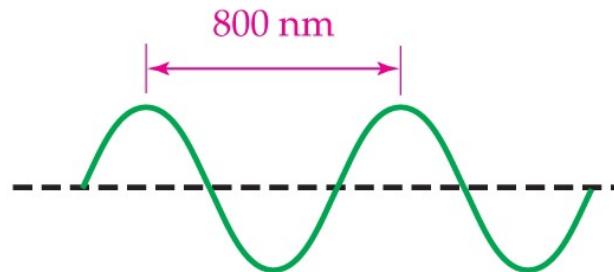


TECHNIQUE	RADIATION		WHAT CAN IT SEE?
Nuclear Magnetic Resonance (NMR) spectroscopy	Radio waves (10^{-3} m)	<p>Magnetisme af atomkerner</p> 	<p>Bestemte atomer (^1H, ^{13}C, ^{19}F, ^{31}P) og hvordan de bygger molekyler op</p> <p>MRI (klinisk billeddannelse)</p>
Infra-red (IR) spectroscopy	Infra-red (10^{-5} m)	 <p>NOTE Molecule vibrations</p>	<p>Bindinger i molekyler (drivhusgasser)</p>
UV-visible (UV/Vis) spectroscopy	Ultra-violet (10^{-8} m)	 <p>NOTE Electrons promoted to higher energy state</p>	<p>Atomspektre; Bindinger og elektroner i bestemte organiske og uorganiske molekyler</p>

Lys har en bølgelængde (fra spids til spids) og frekvens (svingninger pr. tidsenhed)



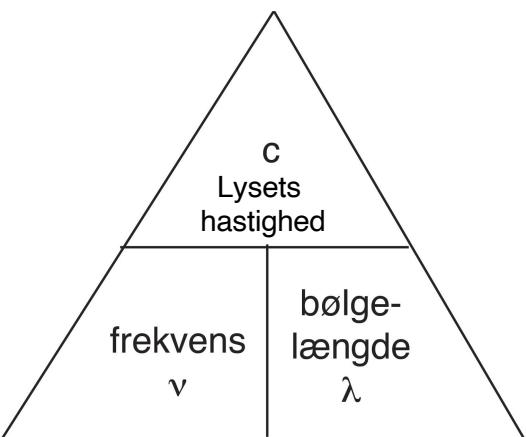
Violet light



Infrared radiation

Lille bølgelængde
høj frekvens
høj energi

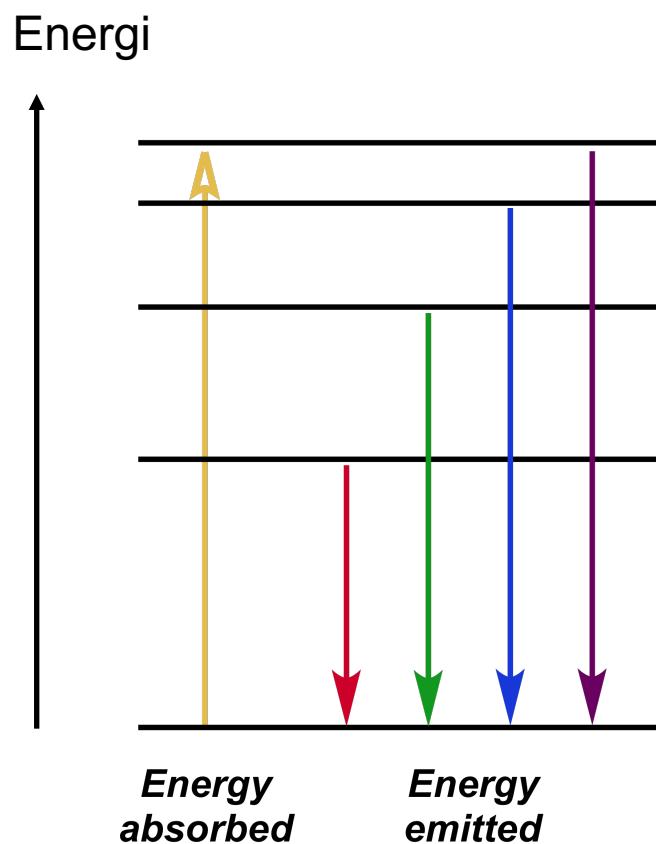
Stor bølgelængde
lav frekvens
lav energi



$$E = h \cdot v = h \cdot (c / \lambda)$$

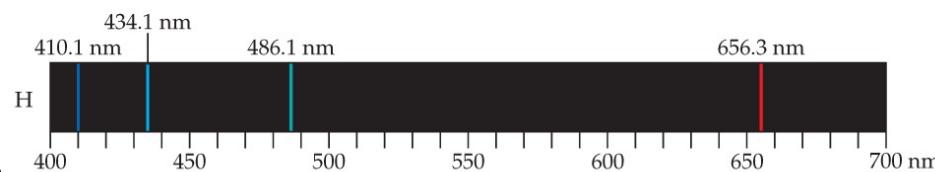
$$h \text{ (Planck's constant)} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$$
$$c \text{ (lysets hastighed)} = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

Hvordan ved vi, at der kun er bestemte tilladte elektronenergier?

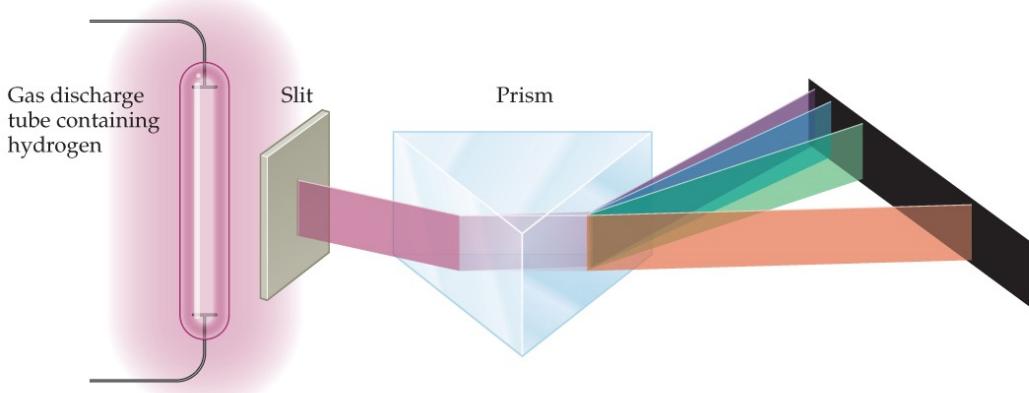


Excited state	λ	n = 2
6	410 nm	2
5	434 nm	2
4	486 nm	2
3	656 nm	2

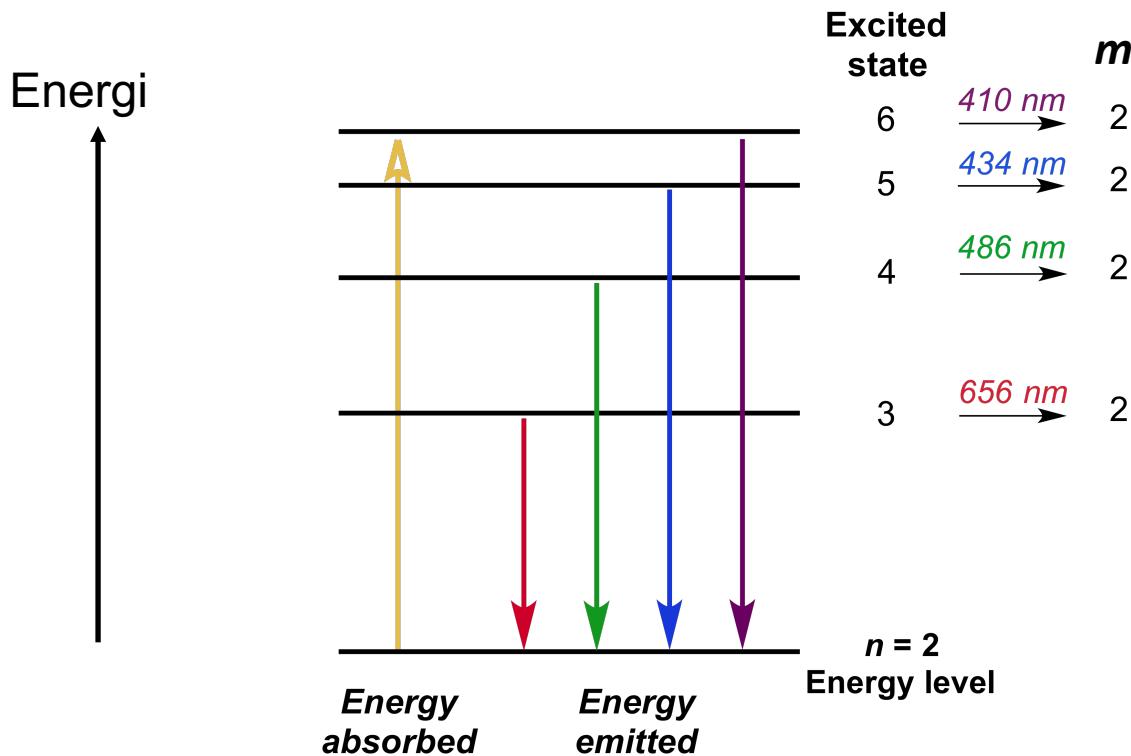
Atom spektre:
En række linjer på en ellers mørk baggrund som et resultat af lys udsendt af et exciteret atom



Energiforskellen mellem niveauerne er $\Delta E = h \cdot (c / \lambda)$



Linjespektrum og diskrete energi-niveauer for H



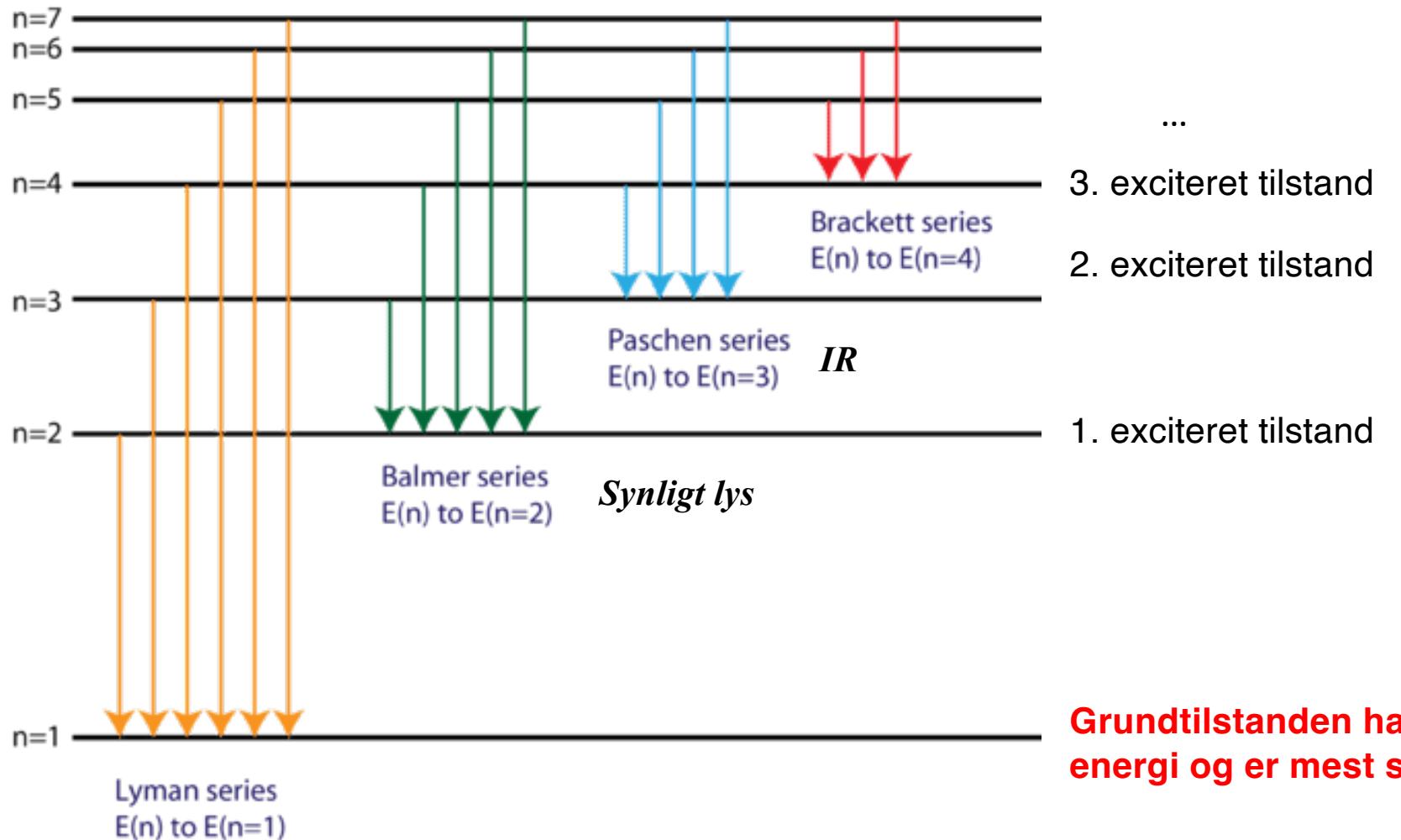
m : indre skal

n : ydre skal

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$R_H (\text{Rydberg constant}) = 1.097 \times 10^{-2} \text{ nm}^{-1}$$

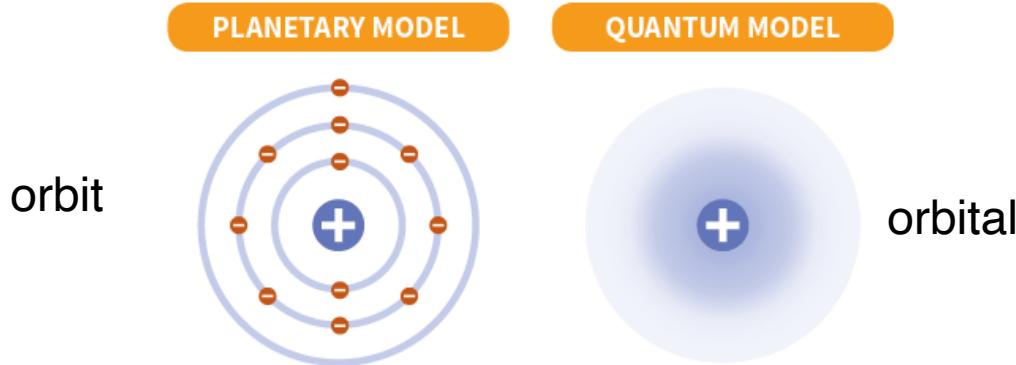
Elektronovergange i H-atom



Fra $n=\infty$ til $n=1$ er energien der bliver frigjort når elektron og proton bliver til H

Schrödinger foreslog atomets kvantemekaniske model: Rummet, elektronen sandsynligvis opholder sig i

$$\hat{H}\psi = E\psi \xrightarrow{\text{målbare energiværdier } E \text{ tilhørende regneprocedure } \hat{H} \text{ ("Hamiltonoperator")}} \psi(x, y, z) \text{ (orbitaler)}$$



NIELS BOHR

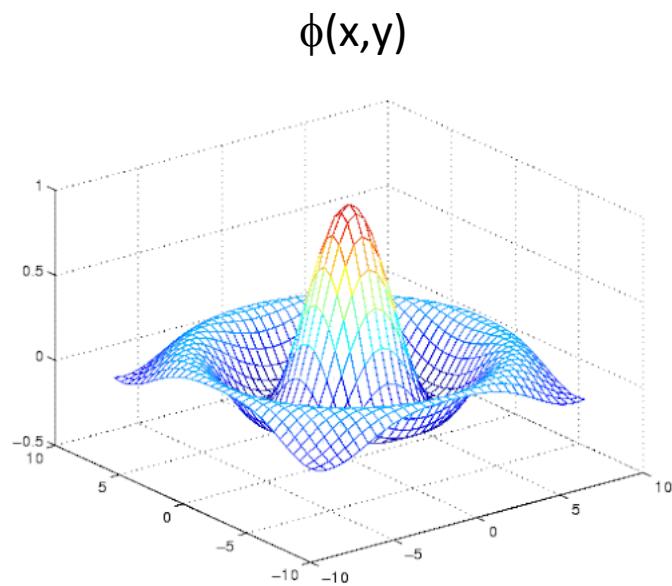
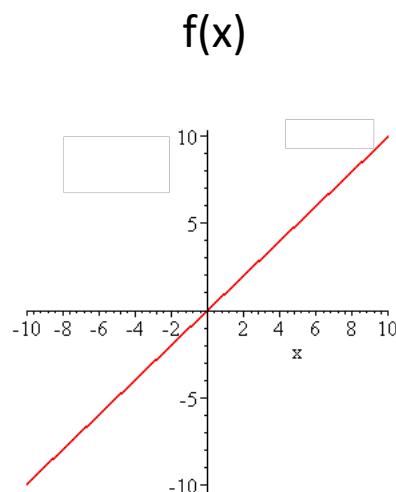
1913



ERWIN SCHRÖDINGER

1926

Problemet er at forestille sig $\psi(x,y,z)$



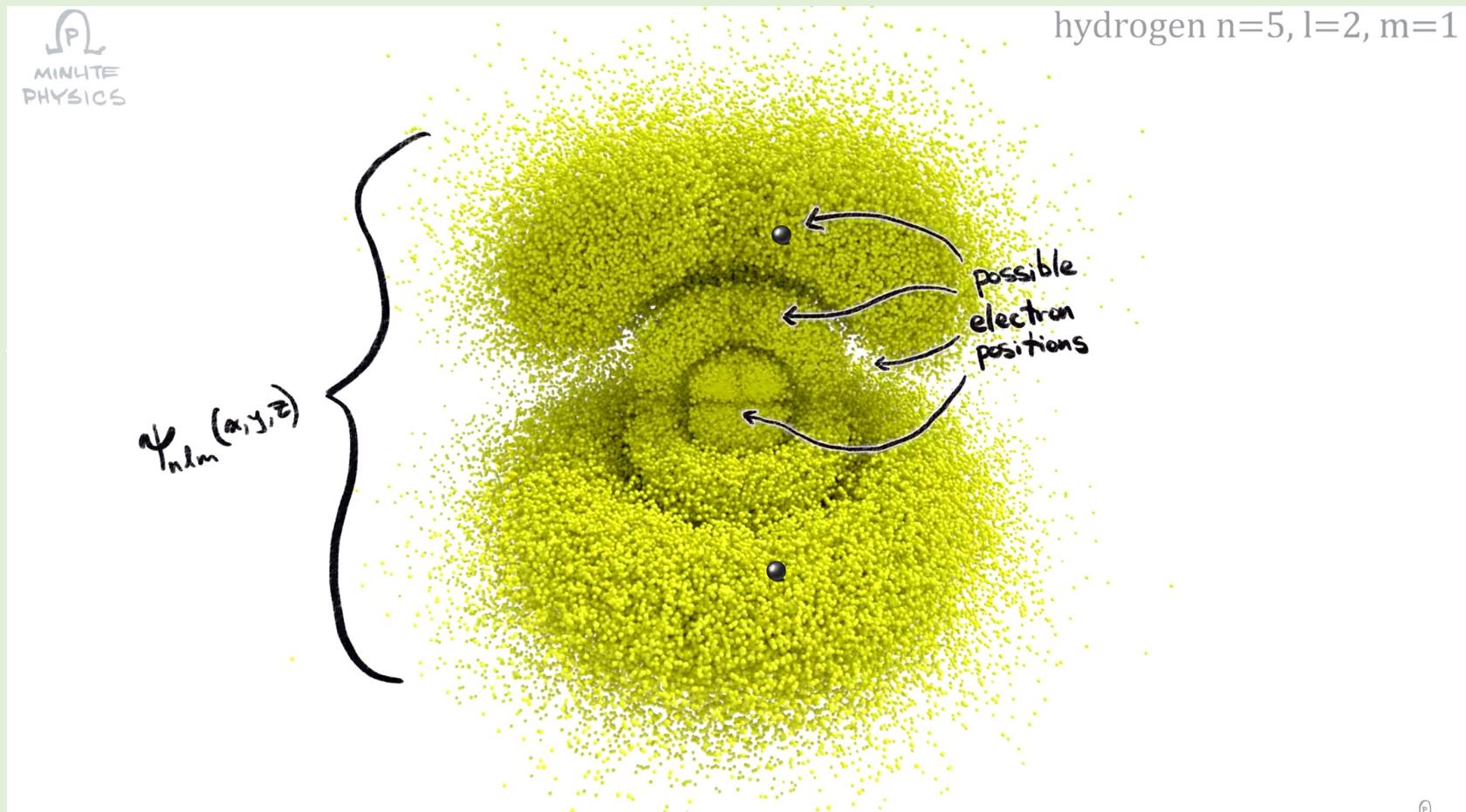
$\psi(x,y,z)$

?

$\psi(x,y,z)$ giver sandsyninghedsfordelingen for elektronen med den givne energi i rummet

Energiniveau n (i Bohrs atommodel) har i virkeligheden n^2

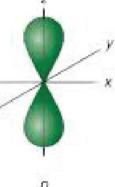
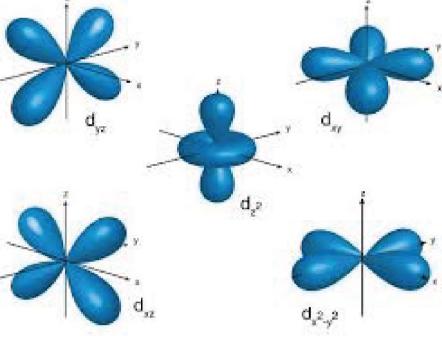
"dobbeltværelser" for elektroner, der beskrives med 3 tal n, l og m_l



Hver orbital kan holde op til 2 elektroner (der er 0, 1 eller 2 elektroner i hver orbital)

<https://www.youtube.com/watch?v=W2Xb2GFK2yc&t=160s>

Afstand fra kernen, orbital-form og orbital-orientering beskrives med de tre "kvantetal" (heltal) n , l og m_l

n hovedkvantetal <i>størrelse</i>	l banekvantetal <i>form</i>	m_l magnetkvantetal <i>rumlig orientering</i>
 1s 2s 3s	 s  p  d	
l orbitaltype (underskalmarkør)	0 1 2 s p d	$2l+1$ -værdier fra $-l$ til $+l$

Tilladte kombinationer af kvantetal n, l og m_l i de første fire skaller (Tab. 5.2)

n	l	m _l	Underskal notation	Antal orbitaler i underskallen	Antal orbitaler i skallen
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	4
	1	-1, 0, +1	2p	3	
3	0	0	3s	1	9
	1	-1, 0, +1	3p	3	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5	
4	0	0	4s	1	16
	1	-1, 0, +1	4p	3	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5	
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7	

$$l = 0, 1 \dots n-1$$

2l+1-værdier fra -l til + l

Der er n underskaller (værdier for l) i skal "n"

Der er n² orbitaler med plads til 2×n² elektroner i skal "n"

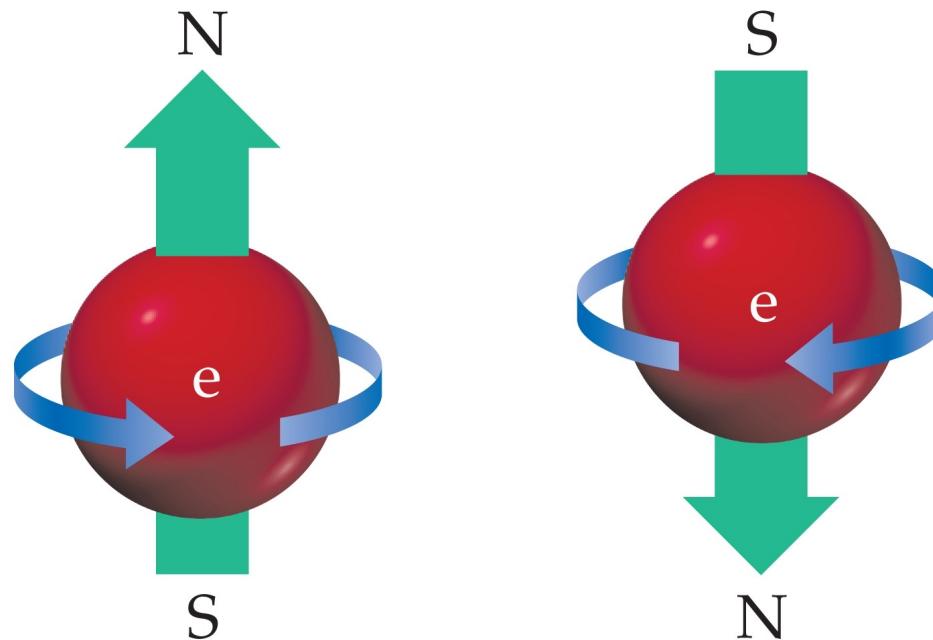
Hver orbital beskrives fuldstændigt af en tilladt kombination af n, l, m_l

Spin (m_s): Hver orbital kan holde to elektroner med forskellige spin-kvantetal (+1/2, -1/2)

Spin er koblet til magnetisme.

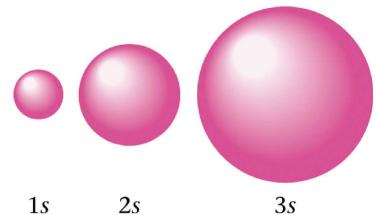
Hver elektron beskrives fuldstændigt af en tilladt kombination af n , l , m_l , m_s

2 elektroner i samme atom kan ikke have de samme 4 kvantetal

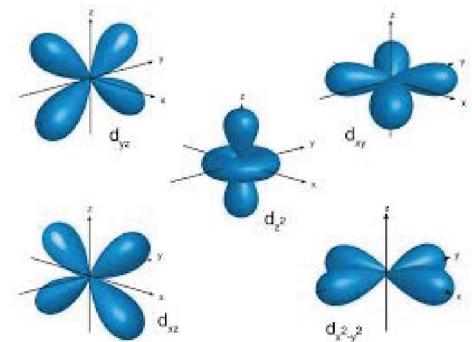


Hvad beskriver vi med 1, 2, 3 eller 4 kvantetal?

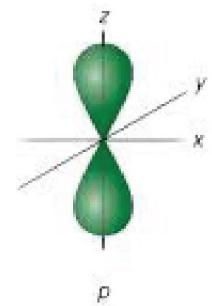
n: **Skallen** (energiniveau i Bohrs atommodell)



n, l: **Underskallen** (orbitaler med samme energi i en skal, f. eks. de fem 3d orbitaler)



n, l, m_l : En bestemt **orbital** (f eks $2p_z$)



n, l, m_l , m_s : En **elektron**

A. Hvor mange **orbitaler** i ét atom kan have kvantetal

- a) $n=4$ og $l=1$? 4p underskal, 3 orbitaler (med plads til 6 elektroner)
- b) $n=3$ og $l=3$? Eksisterer ikke, ikke tilladt kombination; 0 orbitaler

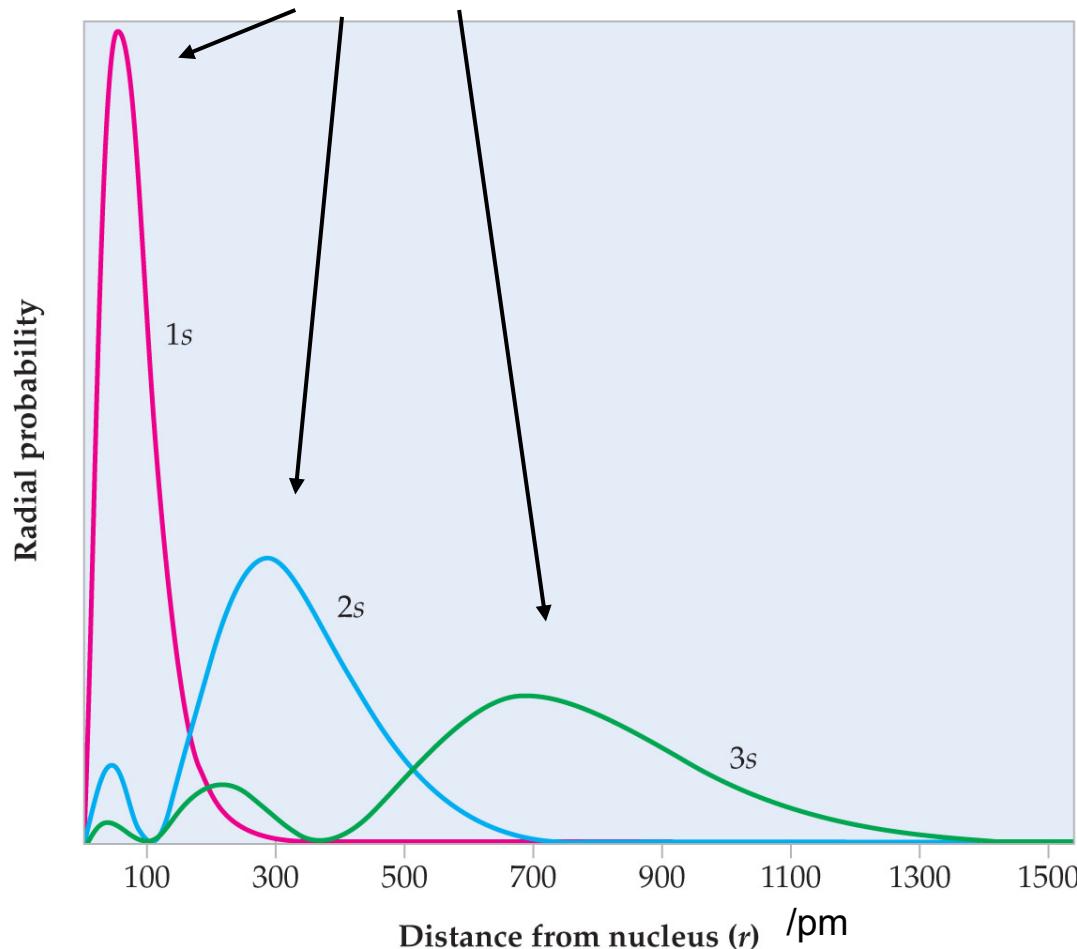
B. Hvor mange **elektroner** i ét atom kan have kvantetal

- a) $n=4$, $l=1$ og $m_l=-1$ En 4p orbital med plads til 2 elektroner
- b) $n=4$, $l=1$ og $m_l=2$ Eksisterer ikke, ikke tilladt kombination, 0 elektroner

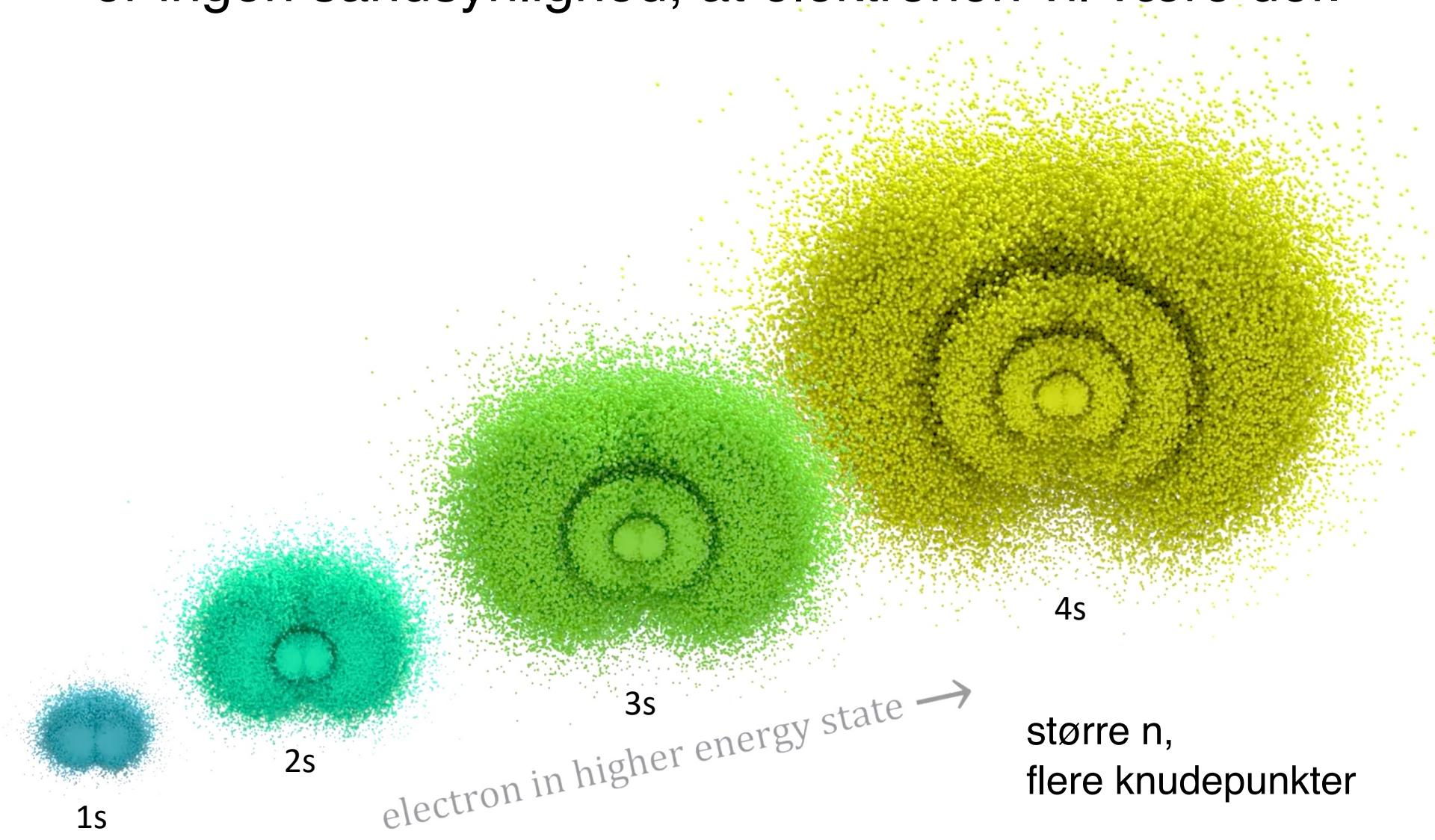
n	l	m_l	Underskal notation	Antal orbitaler i underskallen	Antal orbitaler i skallen
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	4
	1	-1, 0, +1	2p	3	
3	0	0	3s	1	9
	1	-1, 0, +1	3p	3	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5	
4	0	0	4s	1	16
	1	-1, 0, +1	4p	3	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5	
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7	

Sandsynligheden for at finde en elektron med en bestemt afstand fra kernen i s orbitalerne:

Der er en mest sandsynlig afstand for elektronen fra kernen; denne afstand bliver større med stigende n



Der er "knudepunkter" i rummet væk fra kernen: Der er ingen sandsynlighed, at elektronen vil være der.



Der er altid n-1 knudepunkter

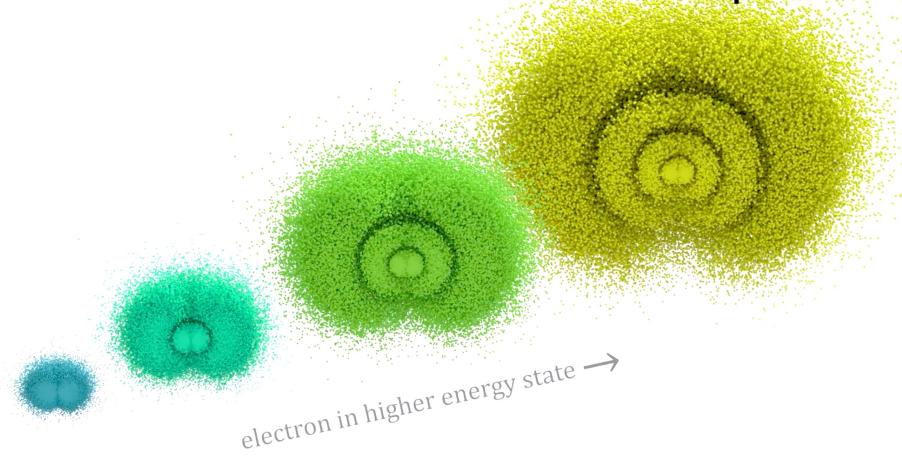
$n=1$ har ingen knudepunkter
 $n=2$ har 1 knudepunkt osv

$4s (n = 4, l = 0)$
3 radiale knudepunkter

Der er 2 slags knudepunkter:

$n-l-1$ "radiale knudepunkter" (interne
contours med 0 elektron sandsynlighed)

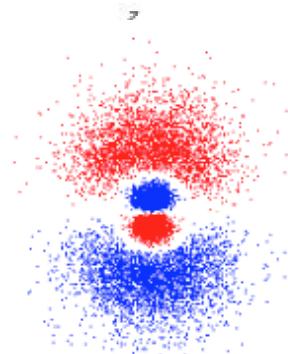
l vinkelknudepunkter: et plan uden sandsynlighed for at
finde elektroner (her xy plan)



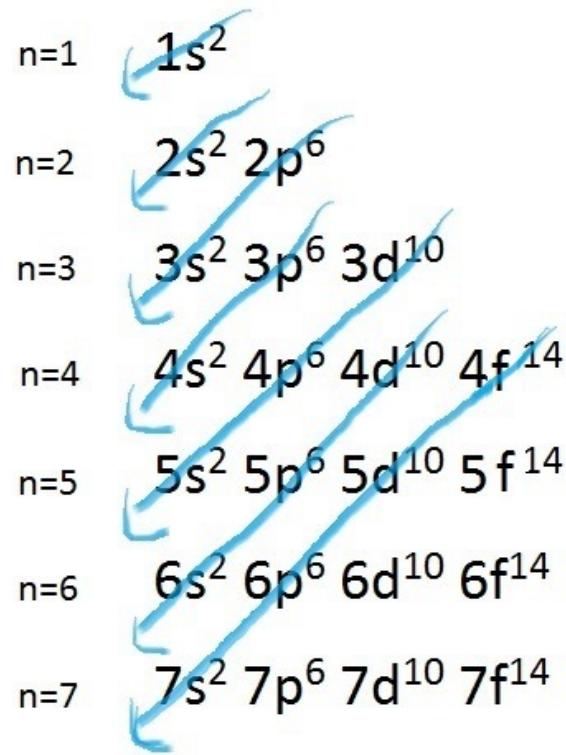
$2p (n = 2, l = 1)$

Hvor mange og hvilke knudepunkter er der i 3p orbitaler?

$n = 3, l = 1; n-1=3-1=2$ i alt
 $n-l-1=3-1-1=1$ radial
 $l = 1$ vinkel

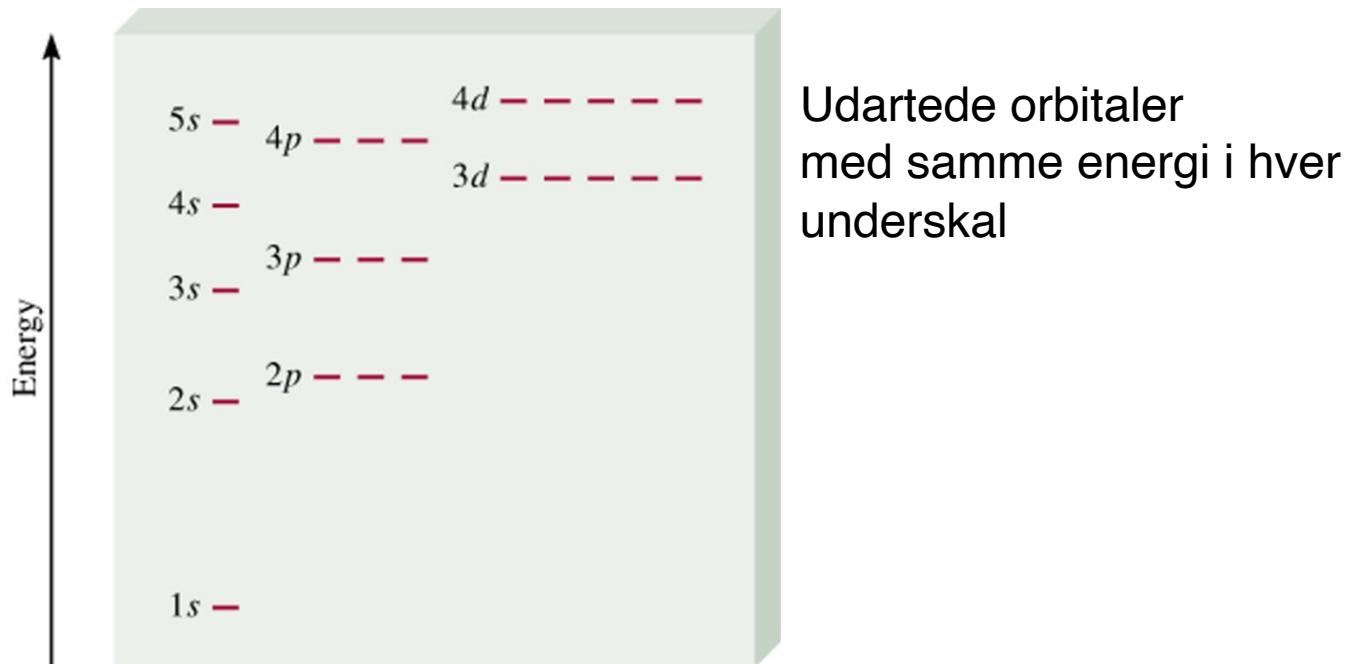


B. Aufbauprincippet (opfyldningsprincippet) beskriver hvordan elektroner fyldes i orbitaler.



Underskaller, hvor elektronen har lavest energi, fyldes først.

Energien stiger i rækkefølge
1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s osv

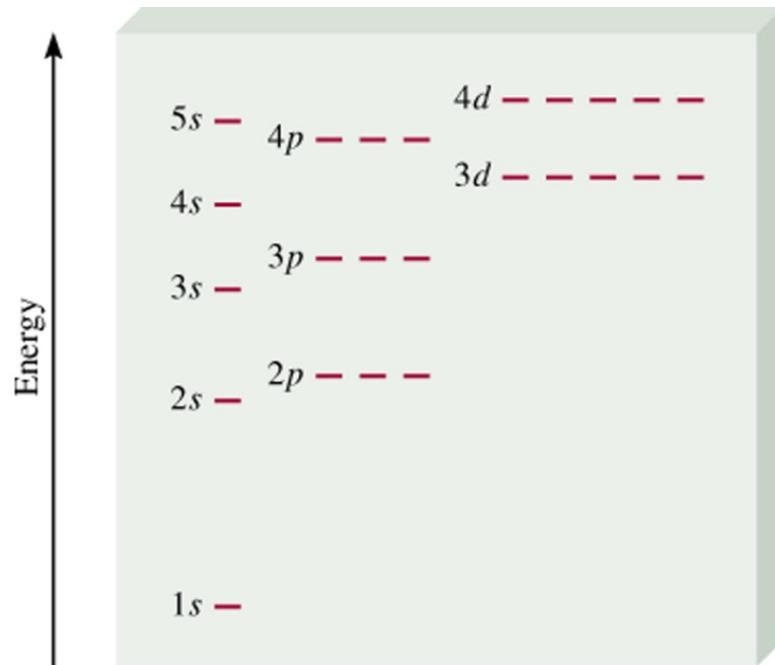


Hvilke orbitaler fyldes med 12 elektroner (Mg)?

”Elektron-konfiguration i grundtilstand” er

Energien stiger i rækkefølge

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s osv



Elektroner i 3d frastødes mere af indre elektroner end dem i 3p,
mens elektroner i 3p frastødes mere af indre elektroner end dem i 3s
Derfor stiger energien i rækkefølge 3s < 3p < 3d

Orden listen til en tabel, brug en ny række til hver ny skal. Hvilken underskal kommer altid før en ny skal påbegyndes?

Rækkefølgen er: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s

n=1	1s ²				
n=2	2s ² 2p ⁶	1s			
n=3	3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰	2s	2p		
n=4	4s ² 4p ⁶ 4d ¹⁰ 4f ¹⁴	3s	3p		
n=5	5s ² 5p ⁶ 5d ¹⁰ 5f ¹⁴	4s	3d	4p	
n=6	6s ² 6p ⁶ 6d ¹⁰ 6f ¹⁴	5s	4d	5p	
n=7	7s ² 7p ⁶ 7d ¹⁰ 7f ¹⁴	6s	4f	5d	6p
		7s	...		

Oktet-reglen: 8 elektroner i s og p skal være foretrukket hvis atomer danner forbindelser

Tabellen viser, hvordan elektroner fyldes ind i orbitaler.
Sammenlign med det periodiske system.

1s		
2s		2p
3s		3p
4s	3d	4p
5s	4d	5p
6s	4f	5d
7s	...	6p

Hvor mange grupper i det periodiske system er i

- a. s-blokken
- b. p-blokken?

s block

p block

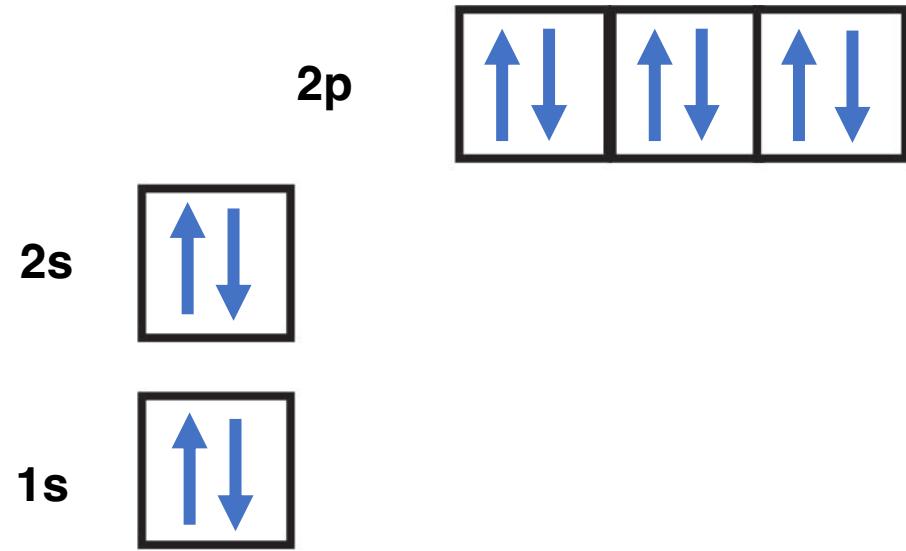
d block

f block

Hunds regel

1. Elektronerne frastøder hinanden mere i samme orbital. De er mere stabile som "uparrede elektroner" i hver deres egne orbitaler.

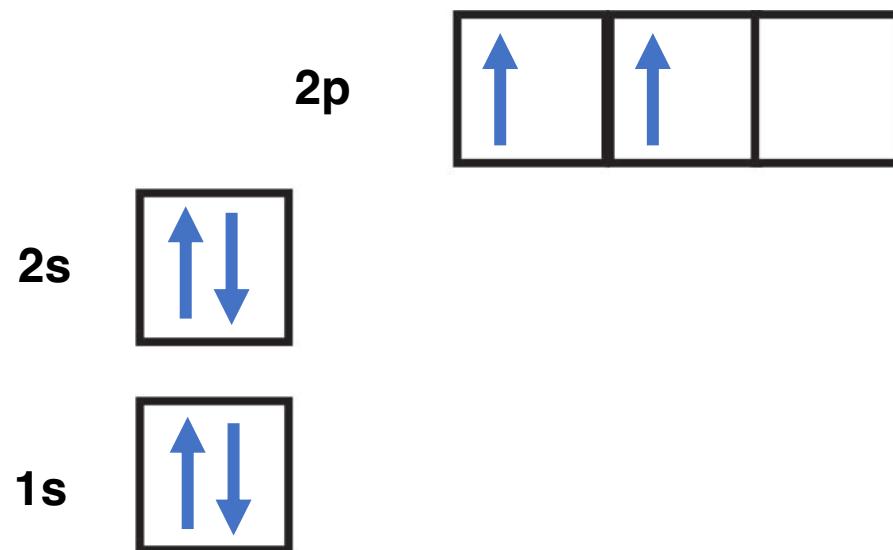
2. Alle uparrede elektroner i enkelt-besatte orbitaler har det samme spin



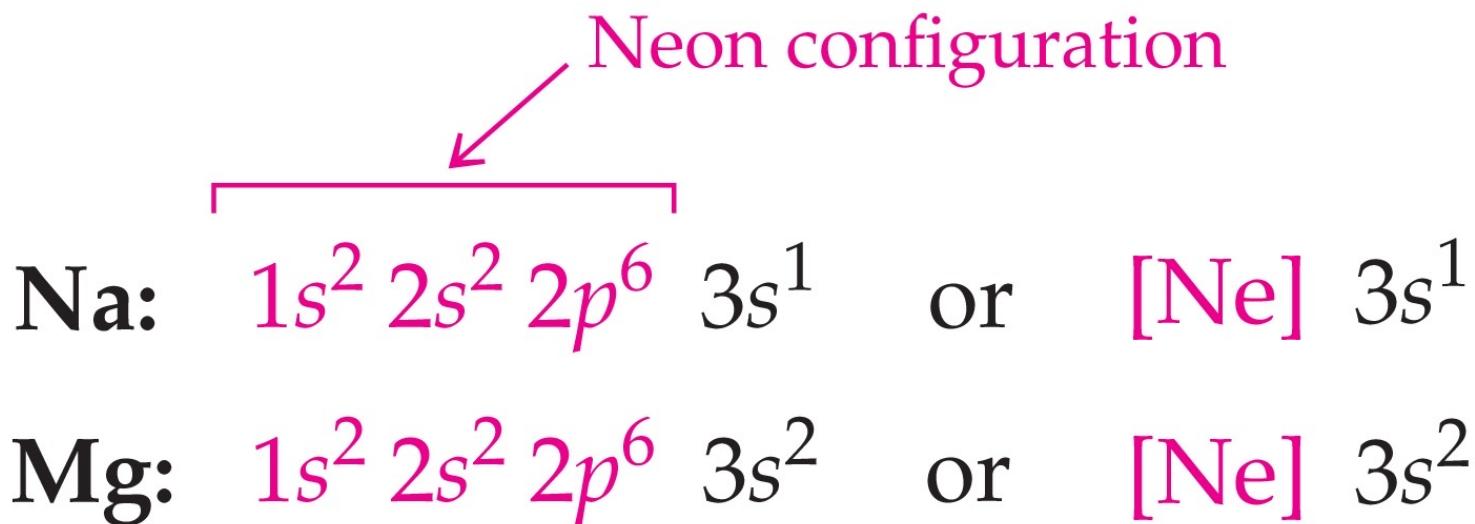
Opfyldning af elektroner i orbitaler med lavest energi betegnes som elektronkonfiguration i grundtilstand

Atomer, hvor elektroner er uparrede, er "paramagnetiske" og bliver tiltrukket af en magnet.

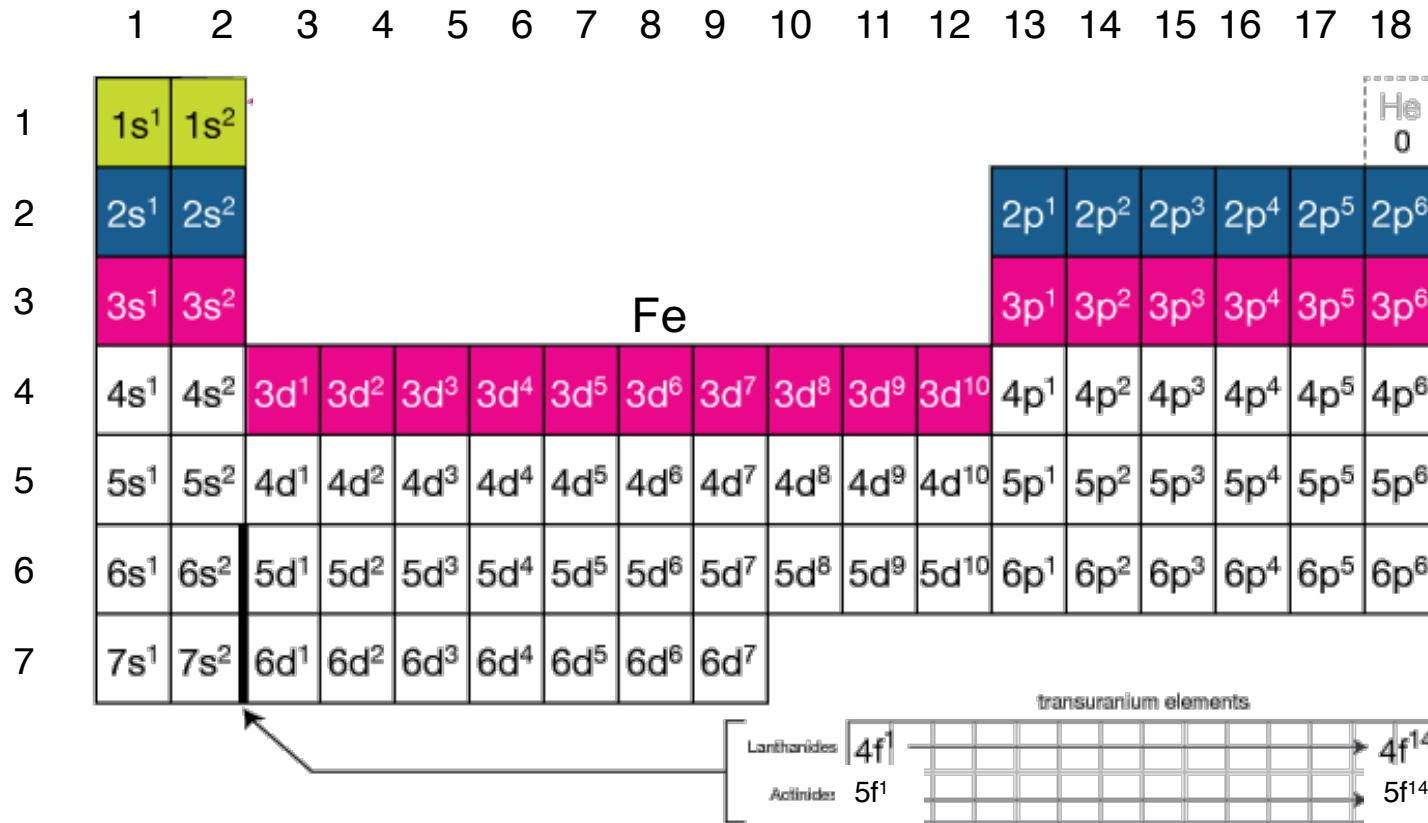
Atomer, hvor alle elektron-spins er parrede, er "diamagnetiske".



I forkortet notation af elektron-konfiguration i grundtilstand skrives det forrige [ædelgas] plus yder-elektronerne ("Valenselektroner")



En valenselektron er en ydre elektron, der kan deltagte i kemisk binding

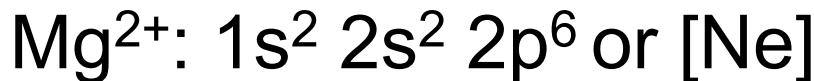
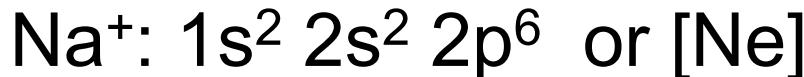


Grundstoffer i samme gruppe har samme antal og slags valenselektroner.

Hvor mange valenselektroner har ^{26}Fe ?
[Ar] 3d⁶ 4s², 8 valenselektroner

Elektronkonfiguration af ioner i hovedgrupperne

Neon configuration



3 Li	4 Be	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar

Elektronkonfiguration af overgangsmetalioner

4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	Zn
---	---------	----------	----------	----------	---------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----

$_{26}Fe$:

[Ar] 3d⁶ **4s²**

"Overgangsmetallerne" mister deres s elektroner først, når de bliver til kationer:

$_{26}Fe^{2+}$:

det er specifikt Fe^{2+} der transporterer O_2 i blodet

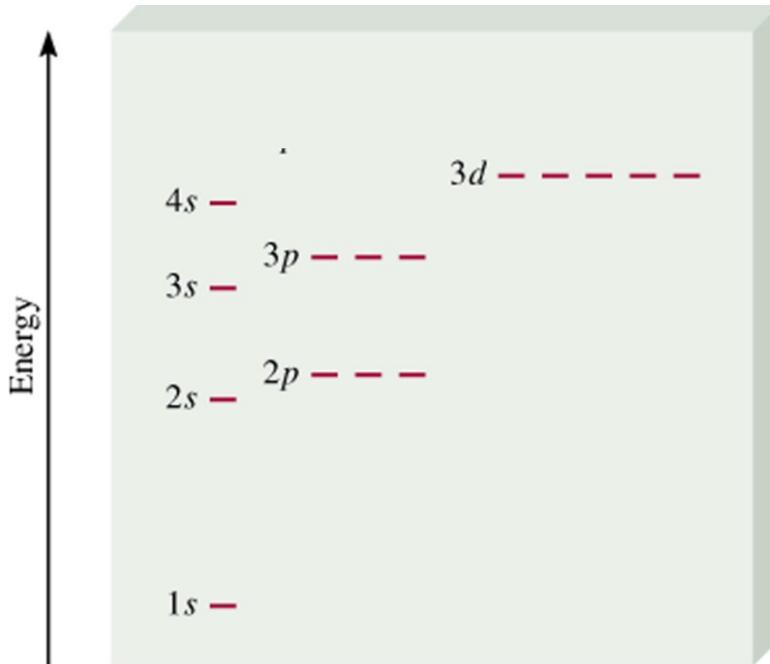
$_{24}Cr$:

[Ar] 3d⁴ 4s²

har 24 elektroner ligesom $_{26}Fe^{2+}$, men et andet antal protoner og en anden elektronkonfiguration.

Atom

^{24}Cr : [Ar] 3d⁴ 4s²



4s har lavere energi end 3d:

3d elektroner frastødes

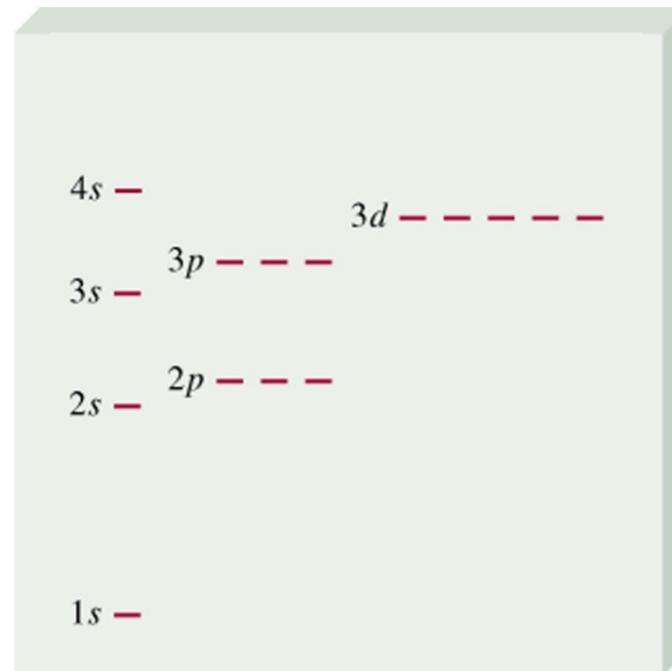
mere af indre elektroner end

4s elektroner gør (pga anden orbital form)

24 protoner i kernen

Overgangsmetal-Kation

$^{26}\text{Fe}^{2+}$: [Ar] 3d⁶



3d har lavere energi end 4s:

frastødning mellem elektroner
er mindre vigtig for kationer.

Rækkefølgen minder om den i H
(n er afgørende)

26 protoner i kernen

Hvilket atom har elektronkonfiguration i grundtilstand **[Xe] 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s¹**?

54 elektroner i xenon core
plus 25 elektroner (fra exponenterne)
 $Z=54+25=79$ elektroner (og protoner)

₇₉Au

Hvilket 3+ ion har elektronkonfiguration
[Ar] 3d⁵?

18 elektroner i argon core
5 elektroner i d orbitaler;
23 elektroner, 26 protoner (ladning 3+)

₂₆Fe³⁺

Opfyldningsprincip og elektronkonfiguration

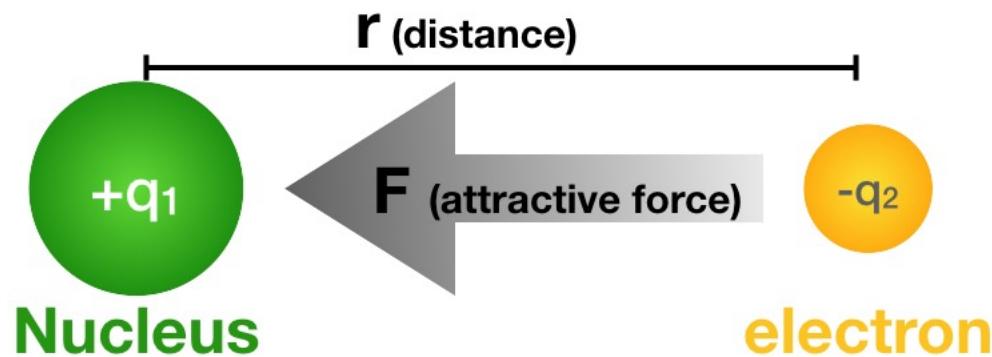
1. Hvor mange elektroner i det samme atom kan have de samme fire kvantetal?
2. Hvor mange elektroner per orbital?
3. Hvad er Hunds regel?
4. Hvilken målbar egenskab følger med uparrede elektroner?
5. Hvordan kan vi huske rækkefølgen af orbital-energier?
6. Hvorfor har grundstoffer i samme gruppe lignende egenskaber?
7. Overgangsmetalkationer har en anden rækkefølge af orbitalenergier end neutrale atomer. Hvilke elektroner mister overgangsmetal-kationer først?

Overblik over orbitaler og kvantetal

1. To elektroner i det samme atom kan ikke have de samme fire kvantetal (Pauli-udelukkelsesprincippet).
2. Hver orbital kan optages af maksimalt to elektroner med forskellige spin-kvantetal.
3. Det mest stabile arrangement af elektroner i en underskal er det, der har det største antal parallelle (uparrede) spins (Hunds regel).
4. Atomer, hvor elektroner er uparrede, er "paramagnetiske" og bliver tiltrukket af en magnet. Atomer, hvor alle elektron-spins er parrede, er "diamagnetiske".
5. Et enkelt skema viser rækkefølgen af orbitalenergier. For elektroner med samme hovedkvantetal stiger energien efter rækkefølgen s< p < d < f. Rækkefølgen fremgår også fra det periodiske system.
6. Rækkefølgen forklarer, hvordan grundstoffer i det periodiske system med samme antal valenselektroner falder i "grupper" med lignende egenskaber.
7. Overgangsmetaller mister elektroner fra yderste s orbital først

C. Kræfter på elektronerne-tiltrækning til kernen og frastødning af andre elektroner

$$F = k_e \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

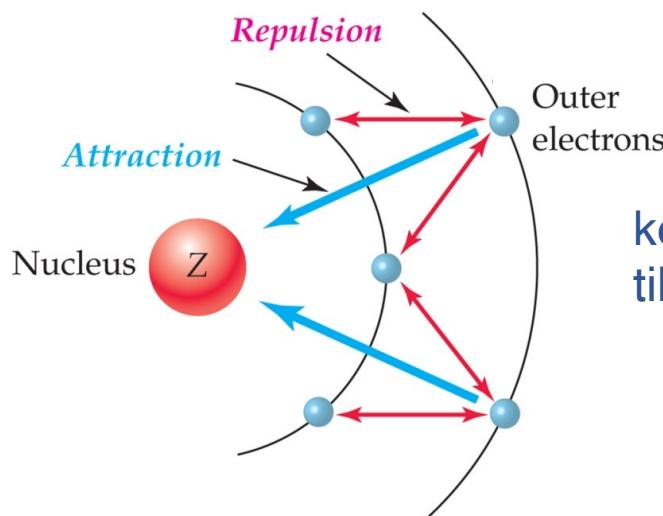


Hver elektron (negativ ladning) tiltrækkes af kernen (positiv ladning), men frastødes også af andre elektroner

Derfor tiltrækkes elektronen mindre hvis andre elektroner er tilstede.

Den er "afskærmet" fra kernen.

Den effektive kerneladning, elektronen oplever, er mindre end den fulde kerneladning.



$$Z_{\text{eff}} = Z - \text{Elektronafskærmning}$$

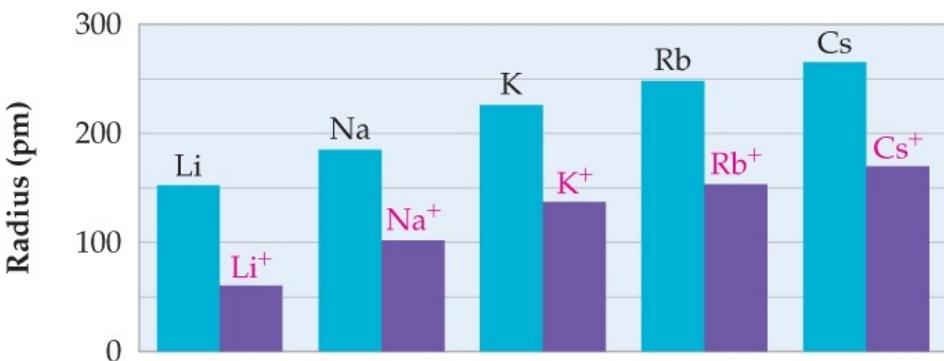
kerneladning der
tiltrækker elektronen

Gennemsnitlig antal elektroner
mellem kerne og elektron af
interesse

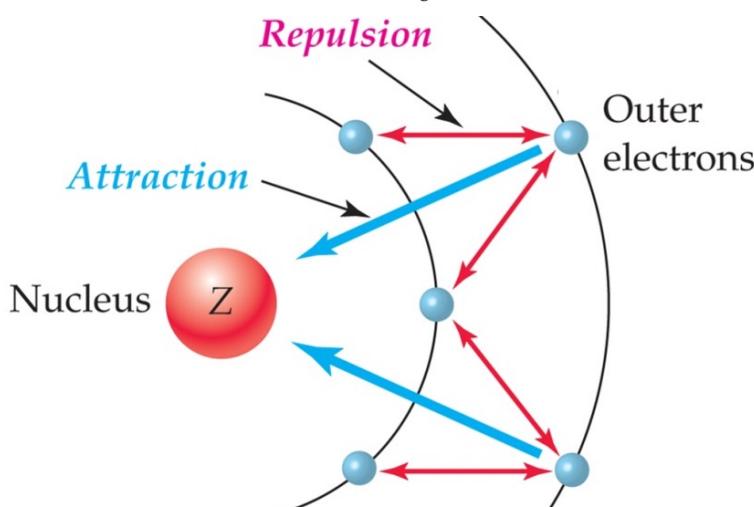
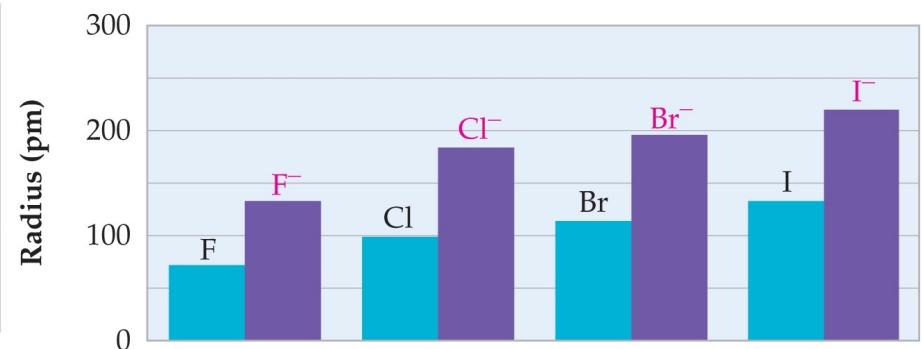
$$Z_{\text{eff}} \leq Z$$

Effekt af antal elektroner:

Kationer er mindre end deres neutrale atomer, elektronerne frastøder hinanden mindre



Anioner er større end deres neutrale atomer, elektronerne frastøder hinanden mere

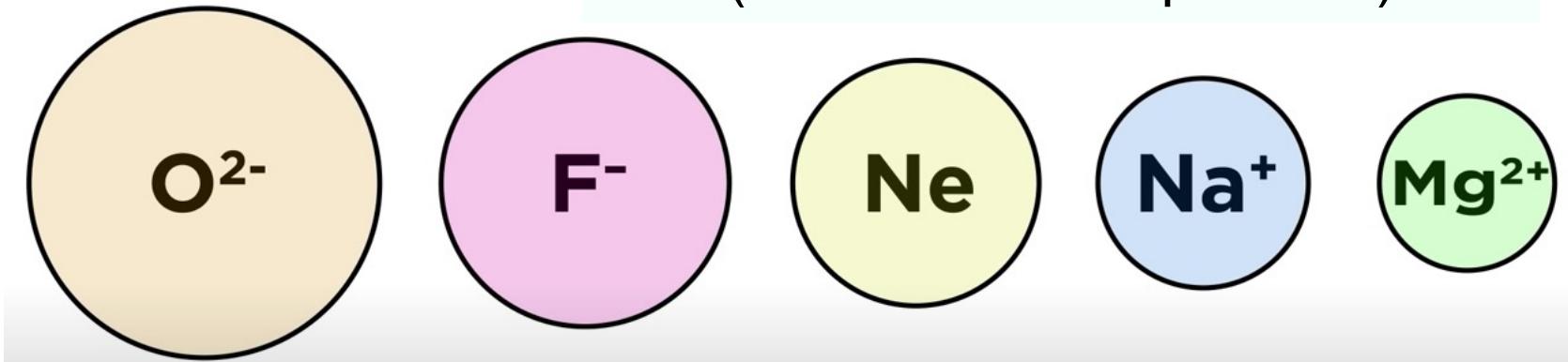


Effekt af kerneladningen på størrelse (ved samme antal elektroner)

11	12
Na	Mg

8	9	10
O	F	Ne

Alle med 10 elektroner $1s^2 2s^2 2p^6$
(isoelektroniske partikler)



Kernen: 8+

9+

10+

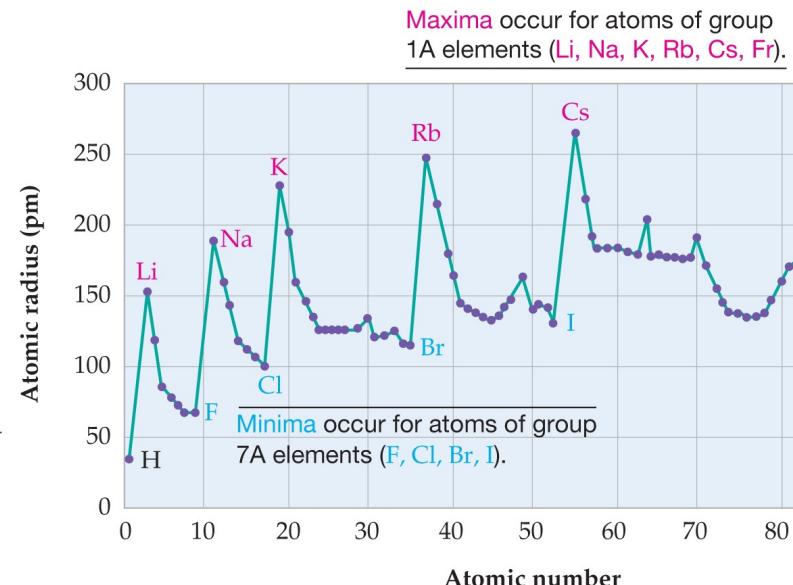
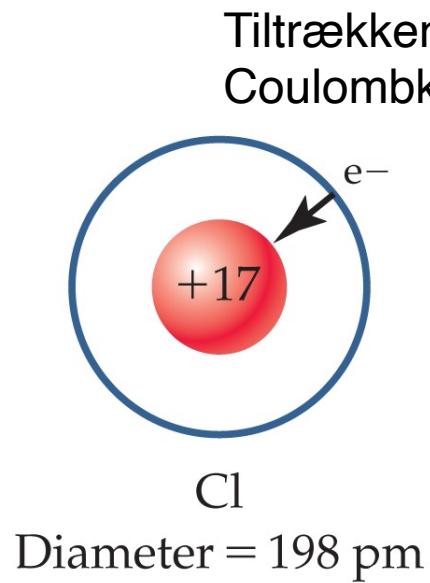
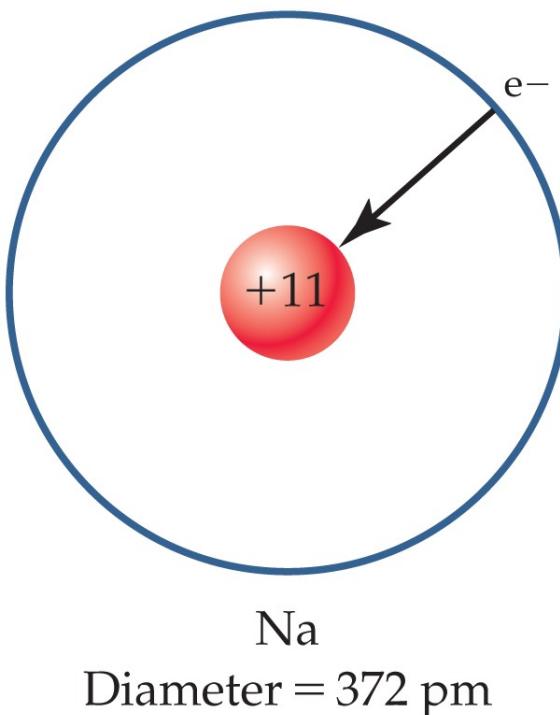
11+

12+

større Z_{eff}

Kombineret effekt af kerneladning og antal elektroner: Atomradius falder fra venstre til højre i en periode

11 Na	12 Mg	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
----------	----------	----------	----------	---------	---------	----------	----------

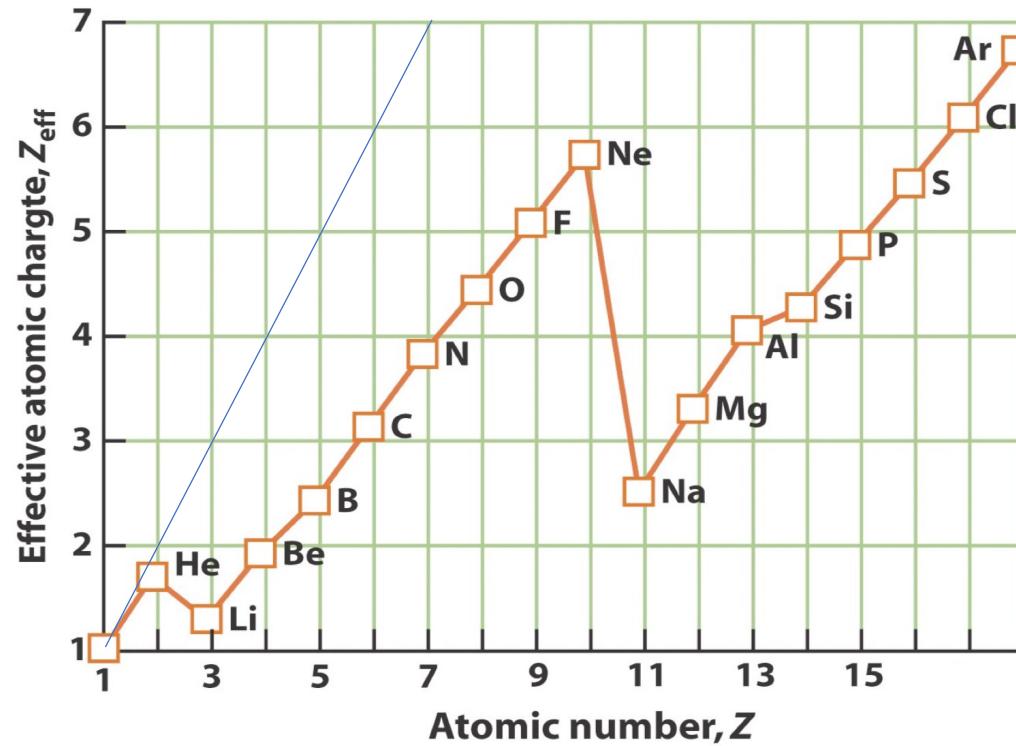


Effektiv kerneladning Z_{eff} stiger gennem en periode

$$Z_{\text{eff}} = Z - \text{Elektronafskærmning}$$

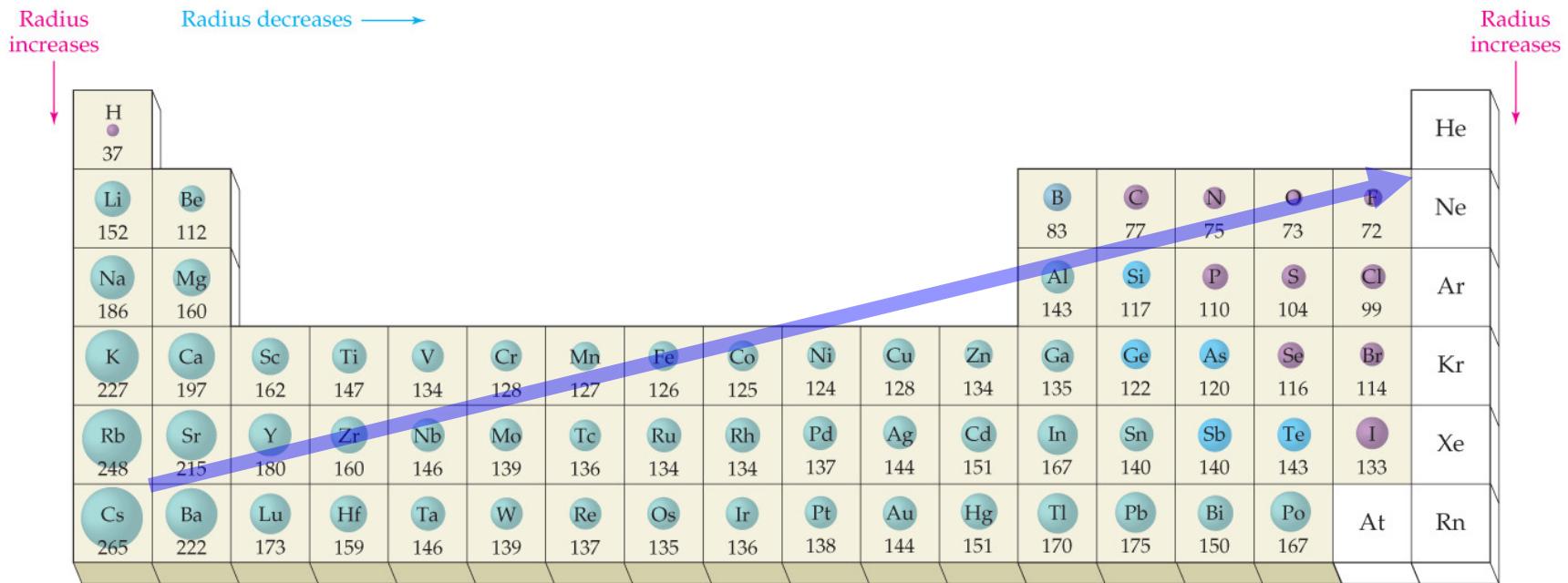
kerneladning set af elektronen

Frastødning stiger ikke i samme takt som Z i en periode



Høj Z_{eff}/n betyder at valenselektroner bliver tiltrukket stærkt af kernen

Høj effektiv kerneladning Z_{eff} og lille skalnummer gør
atomer små



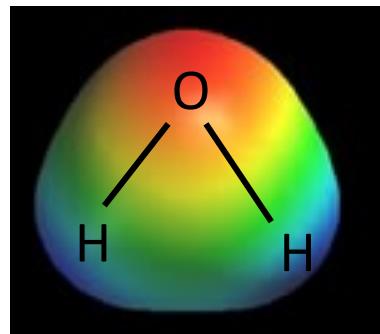
Tiltrækning elektroner i skal n til kernen er proportional til $(Z_{\text{eff}}/n)^2$

Elektronegativitet : Hvor meget tiltrækker atomet elektroner

Hvor meget "vil atomet beholde sine yderste elektroner"= Ioniseringsenergi*

Hvor meget "vil atomet tiltrække en ekstra elektron"= Elektronaffinitet**

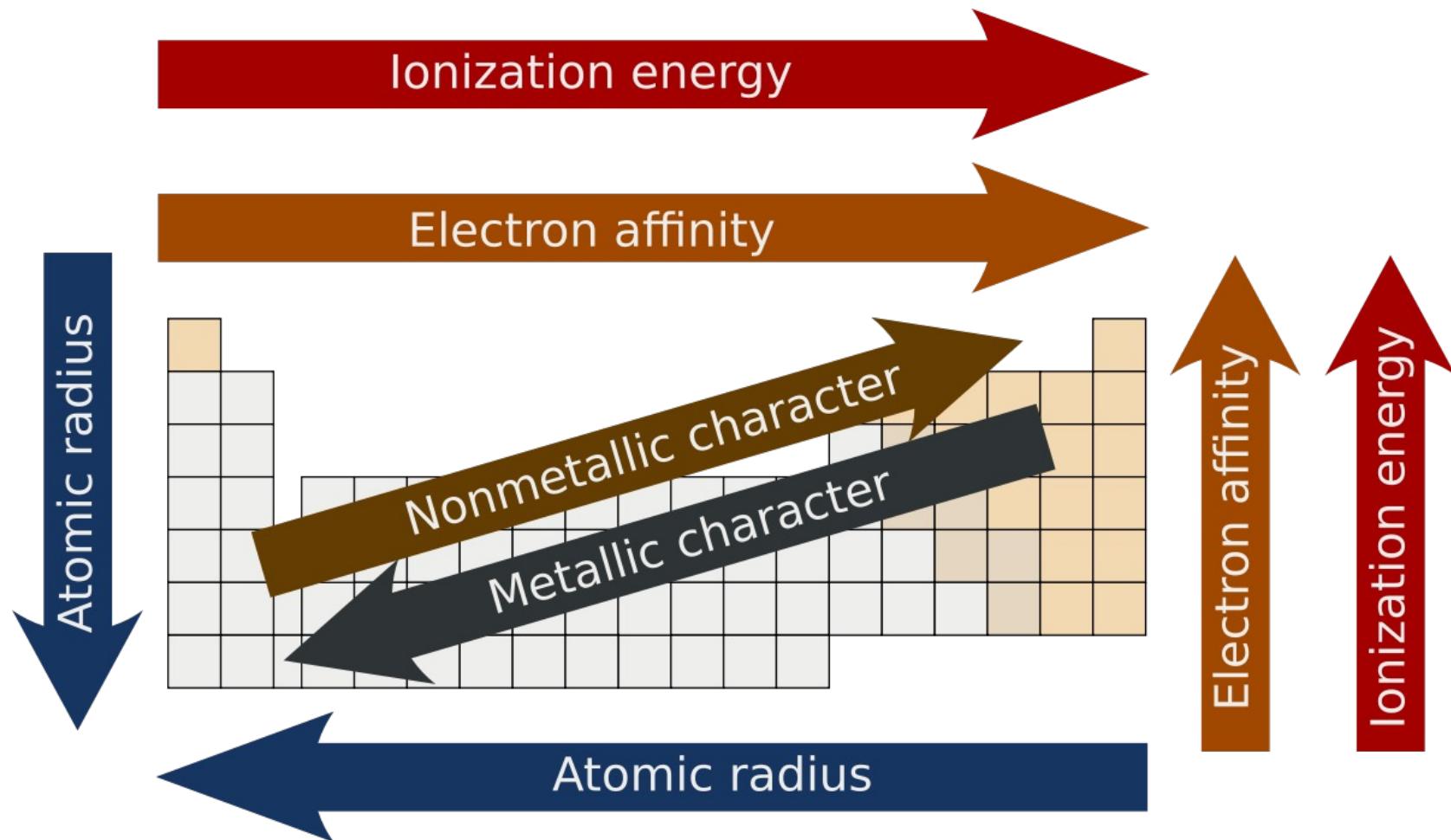
$$\text{Elektronegativitet} = \frac{\text{Ioniseringsenergi} + \text{Elektronaffinitet}}{2}$$



* Energien det koster at fjerne en elektron i gasfasen fra atomet

**Energien der bliver fri hvis grundstof X optager en elektron og bliver til X⁻

Trends i det periodiske system: Egenskaberne er domineret af evnen til at trække elektroner



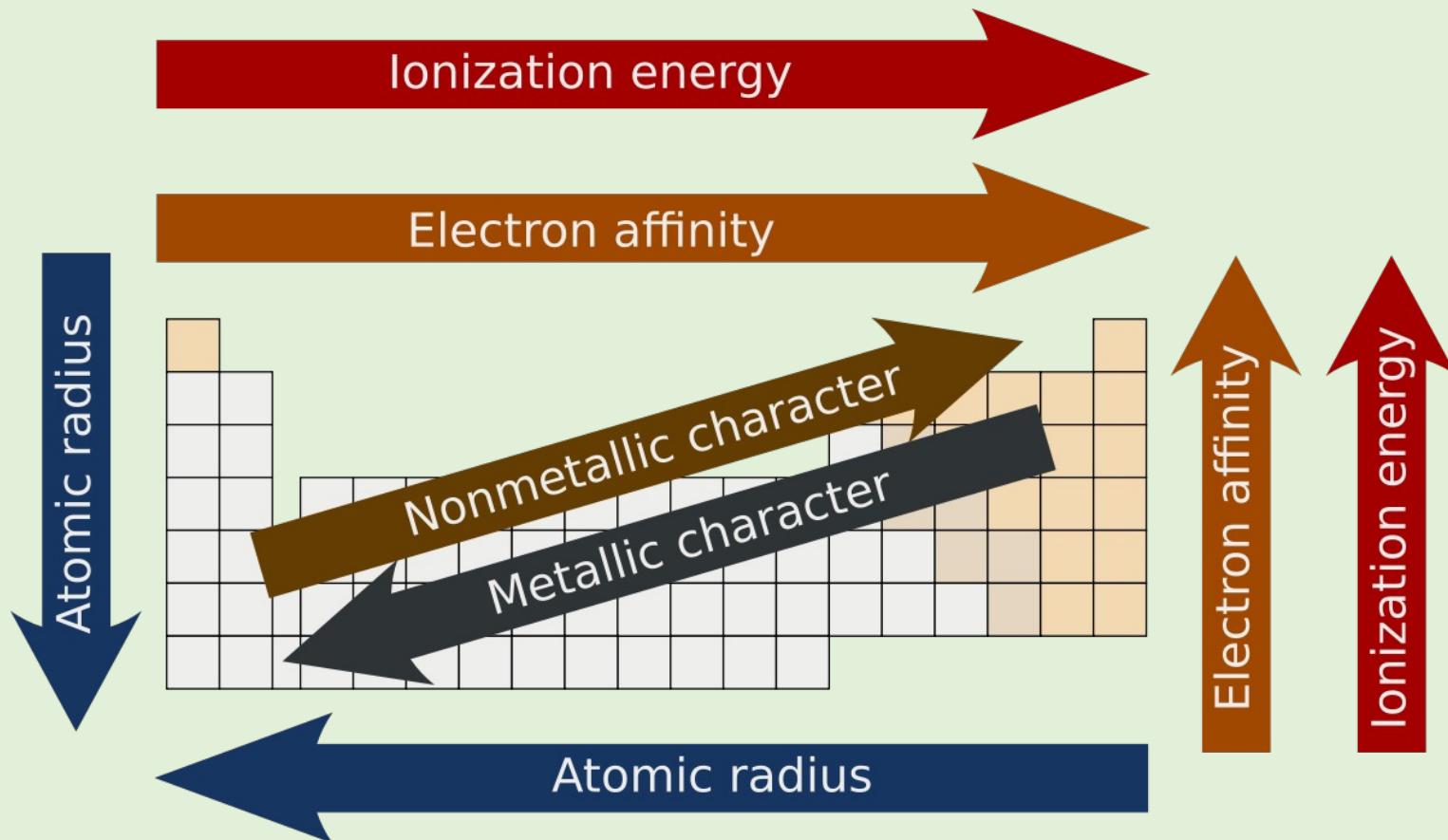
Hvilket af disse generelle udsagn er korrekt?

Ned gennem en gruppe stiger ioniseringsenergien.

Ned gennem en gruppe falder atomradius.

Fra venstre mod højre i en periode falder ioniseringsenergien.

Fra venstre mod højre i en periode falder atomradius. ✓



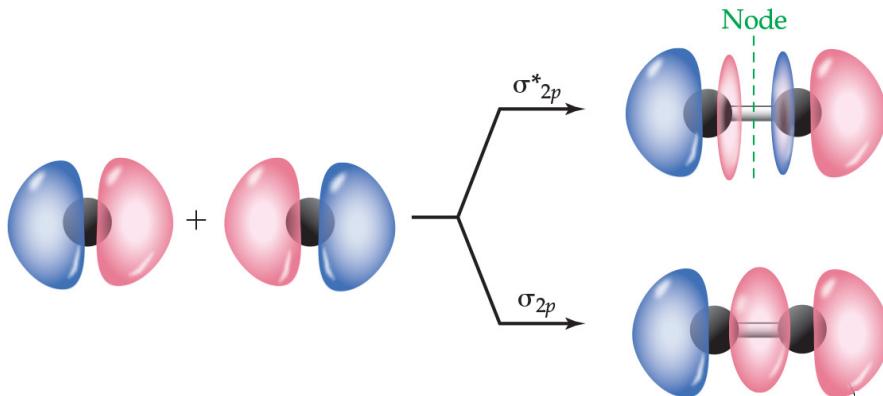
Ioniseringsenergien for at fjerne en elektron i gasfasen fra ioner viser store spring når ædelgas-konfigurationen bliver ødelagt

		1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A
		Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl
1. Ioniseringsenergi	M til M ⁺	496	738	578	787	1,012	1,000	1,251
2. Ioniseringsenergi	M ⁺ til M ²⁺	4,562	1,451	1,817	1,577	1,903	2,251	2,297
3. Ioniseringsenergi	M ²⁺ til M ³⁺	6,912	7,733	2,745	3,231	2,912	3,361	3,822
	...	9,543	10,540	11,575	4,356	4,956	4,564	5,158
		13,353	13,630	14,830	16,091	6,273	7,013	6,540
		16,610	17,995	18,376	19,784	22,233	8,495	9,458
		20,114	21,703	23,293	23,783	25,397	27,106	11,020

kJ/mol

I hvilken grupper er et grundstof med store spring fra 2. til 3. Ioniseringsenergi?

Næste uge: orbitaler i molekyler og molekyl-egenskaber



26050 Kemi for Life Science

- 1 Kemisk regning, periodisk system, navngivning
- 2 Reaktioner
- 3 Elektroner, orbitaler og periodiske trends
- 4 Bindinger**
- 5 Energi
- 6 Faste stoffer og opløsninger
- 7 Reaktionskinetik
- 8 Ligevægt
- 9 Ligevægtsberegninger
- 10 Drivkraft af kemiske reaktioner
- 11 Kernekemi
- 12 Overgangsmetaller og komplekser
- 13 Organisk og biologisk kemi

Den 1. obligatoriske aflevering er tilgængelig



26050 Chemistry for Life Science Fall 23



My Course ▾ Activities ▾ Content Assignments Discussions Video & Streaming

The background features a blue globe on the left and a portion of a periodic table on the right, with the text "Chemistry for Life Science Fall 23" overlaid.

- Checklist
- FAQ
- Peergrade
- Quizzes
- Self Assessments

Quiz List

Help

Current Quizzes	Evaluation Status	Attempts
Obligatorisk aflevering 1 ▾ Due on 26 September, 2023 5:00 PM	Feedback: On Attempt	/ Unlimited

4.1 Valenselektroner: Lewis Strukturer og VSEPR

A periodic table highlighting the valence electrons (Lewis structures) for the main group elements. The table is organized into groups (A and B) and periods (1 to 8). Elements are shown with their atomic number, group number, and symbol, followed by their Lewis dot structure.

1 1A	2 2A							13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A			
•H	•Be•							•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	He:			
•Li	•Na	•Mg•	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 1B	10 2B	•Al•	•Si•	•P•	•S•	:Cl:	:Ar:

Tegn Lewis strukturen for BH_3 og PH_3

	C	N	O	Halogen
Valenselektroner	4	5	6	7
Antal bindinger	4	3 (max 4)	2 (max 3)	1
Lone pairs	0	1	2	3

Regler for Lewis Strukturer med flere atomer og muligheder:

Tæl valenselektronerne og læg dem sammen; tilføj for negative ioner, tag fra for positive

Det mindst elektronegative element plejer at være i midten, H og F vil ikke være i midten

Tegn enkelte kovalente bindinger til midterste atom

Skriv de resterende elektroner som lone pairs

Lav lone pairs om til dobbelt- og tripelbindinger for at give alle atomer undtagen H en oktet

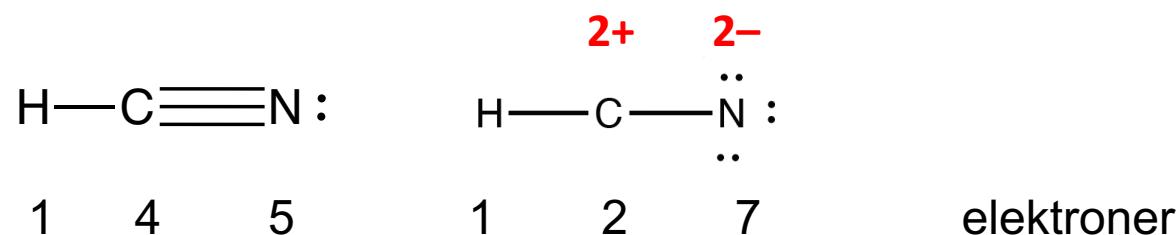
HCN?

1 1A	•H	2 2A																18 8A
•Li		•Be •																He :
•Na		•Mg •	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 1B	11 2B	•B •	•C •	•N •	•O •	•F •	•Ne :	
												•Al •	•Si •	•P •	•S •	•Cl •	•Ar :	

Ud over oktet viser "Formelle ladninger" om strukturen er god:

- Bindingselektroner bliver i et regnskab fordelt på begge bindingsparter
- Ikke-bindingselektroner bliver ved atomet
- antal valenselektroner i grundstoffet minus antal elektroner på atomet i molekylstrukturen giver ladningen

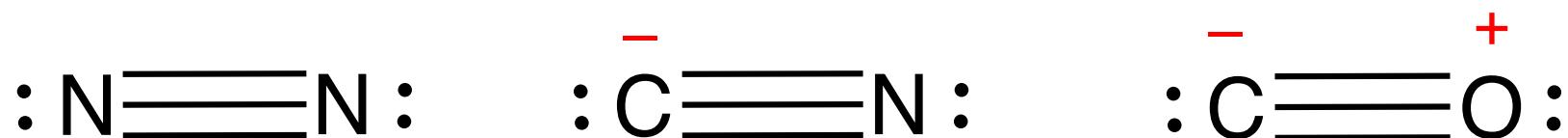
14 4A	15 5A	16 6A	:
·C·	··N··	··O··	



Lewis strukturer med færre ladninger og negativ ladning på mere elektronegative atomer er mere sandsynlige/stabile i realiteten

Hvad er de formelle ladninger i disse strukturer med identisk antal og fordeling af elektroner ("isoelektroniske forbindelser")?

14	15	16
4A	5A	6A
··C··	··N··	··O··

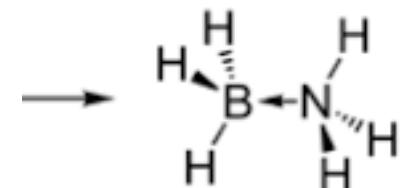
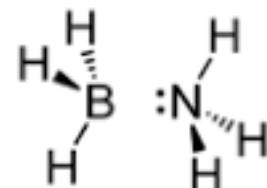
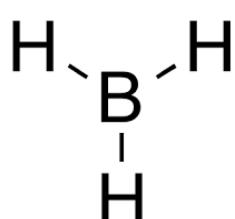


antal valenselektroner i grundstoffet (antal den bør have) minus
antal elektroner på atomet i strukturen (antal den faktisk har)
giver ladningen

Cyanid og carbonmonoxid er giftstoffer fordi de
binder til Fe^{2+} i kroppen - hvorfor?

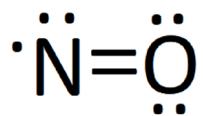
Undtagelser fra oktetreglen

Be, B, Al (elektronmangel)



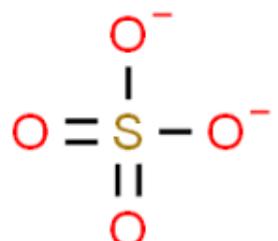
Kan opnå oktet ved at indgå en "koordinativ binding" med et molekyle der bidrager begge e⁻

Radikaler (uparret elektron)



Uparret elektron på mindst elektronegativt atom

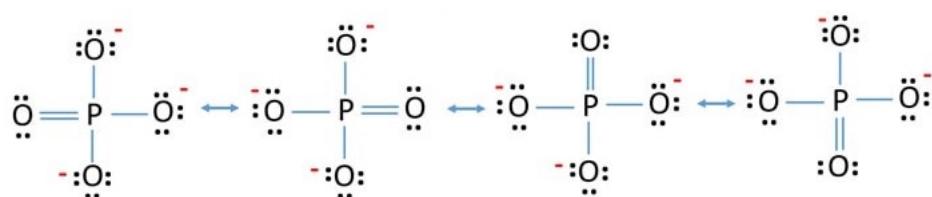
Grundstoffer i periode > 2



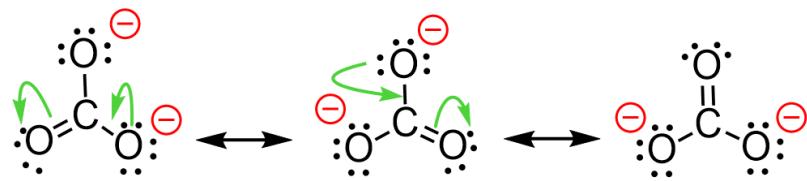
Resonans:

Nogle strukturer er en mellemting* mellem flere mulige strukturer (ikke et hurtigt skift mellem strukturerne)

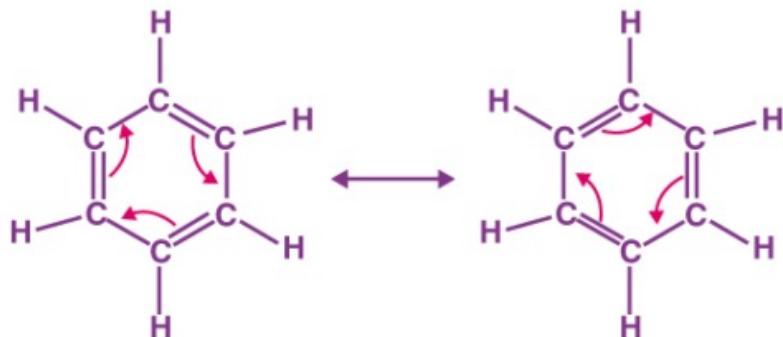
Dette vises med en dobbelt pil \longleftrightarrow



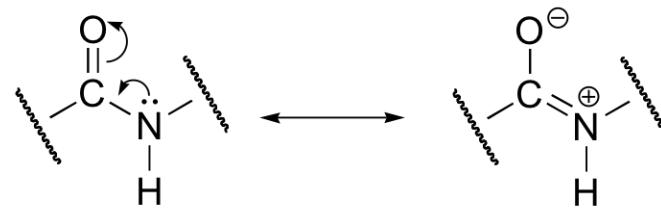
Phosphat (PO_4^{3-}), f eks i DNA



Carbonat (CO_3^{2-}), f eks i blod
(elektronforskydning kan vises med buede pile)



Benzen, f eks i aminosyrer



peptidbinding, f eks i proteiner

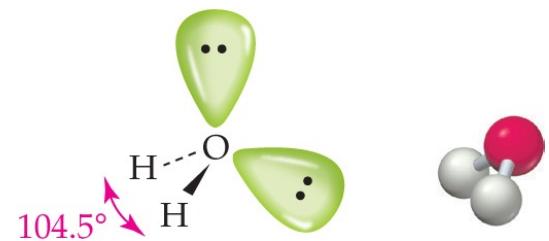
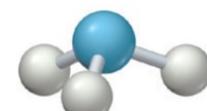
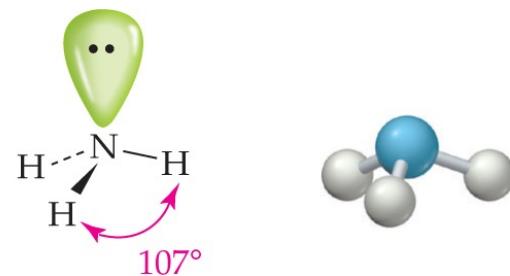
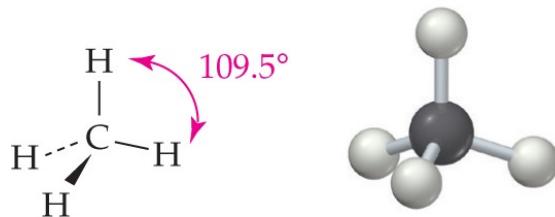
* Denne mellemting kaldes for resonanshybrid

Valence Shell Electron Pair Repulsion (VSEPR)

forudsiger formen på et molekyle

Elektronskyer frastøder hinanden

Bindingsvinklerne falder, når antallet af lone pairs stiger

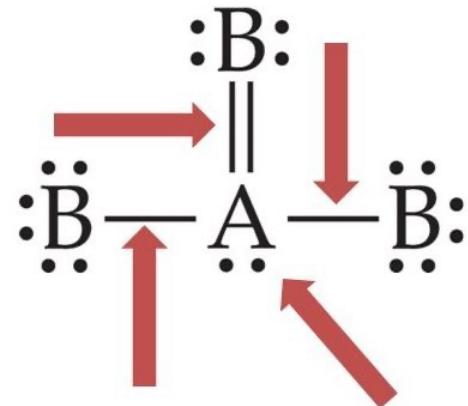


frastødning:

binding-binding < lone pair-binding < lone pair-lone pair

1. Brug "Lewis strukturer" og bestem antal forskellige steder, hvor elektroner befinder sig

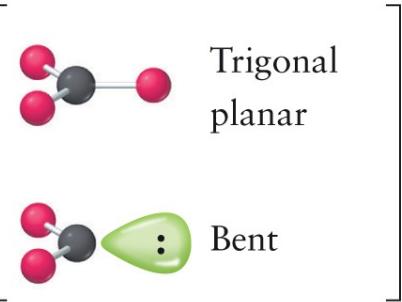
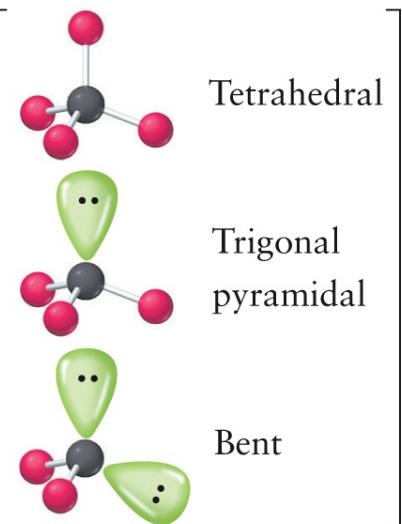
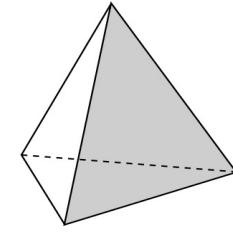
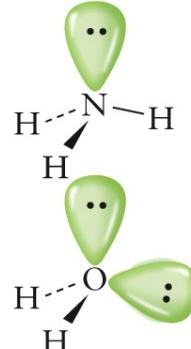
1 elektrondomæne hver



4 steder med elektroner

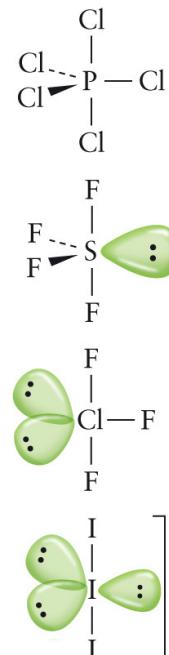
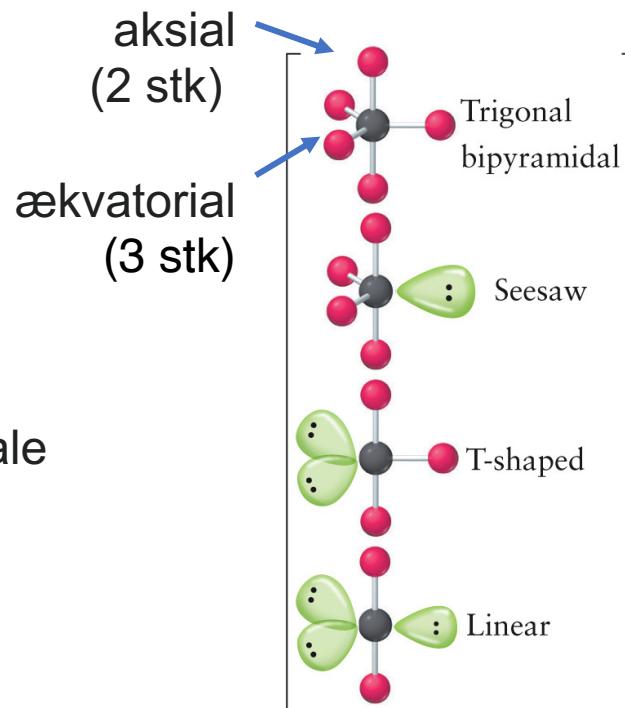
2. Forudsig fordelingen af alle elektronskyer
3. Forudsig fordelingen af atomerne (= molekylgeometri)

Geometri omkring atomer med 2, 3, 4 elektronskyer

Number of Charge Clouds	Molecular Shape (Geometry)	Example	Bindingsvinkel
2	 Linear	$\text{O}=\text{C}=\text{O}$ 180°	
3	 Trigonal planar Bent	$\text{H}\cdots\text{C}=\text{O}$ 120°	
4	 Tetrahedral Trigonal pyramidal Bent	$\text{H}\cdots\text{C}-\text{H}$ 109°	 

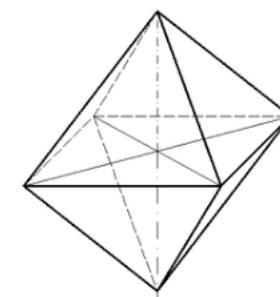
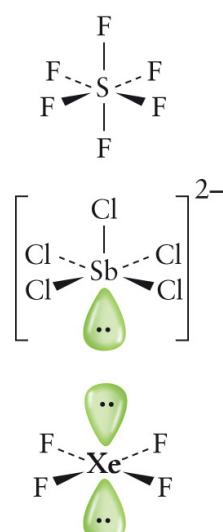
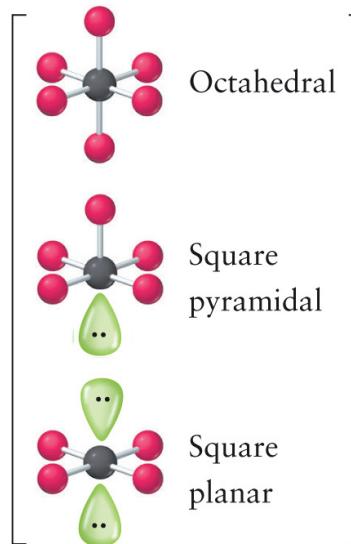
Geometri omkring atomer med 5 eller 6 elektronskyer (efter 2. periode)

2 forskellige positioner

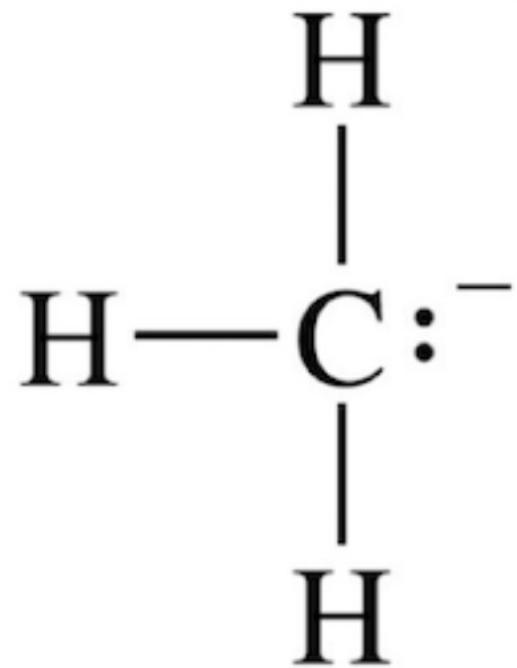
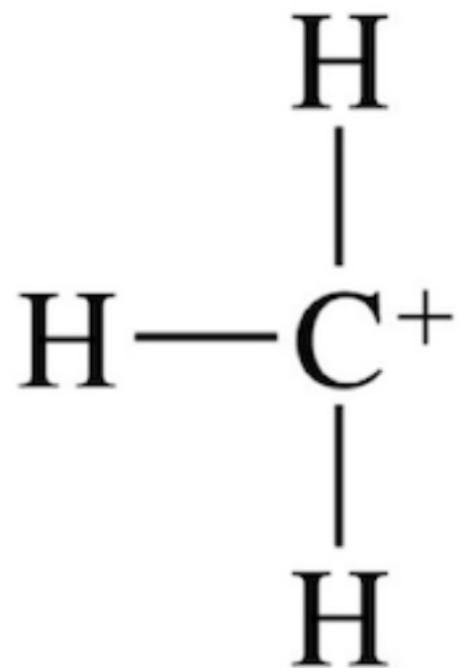


lone pairs er ækvatoriale

ens positioner, 2 lone pairs
står modsat hinanden



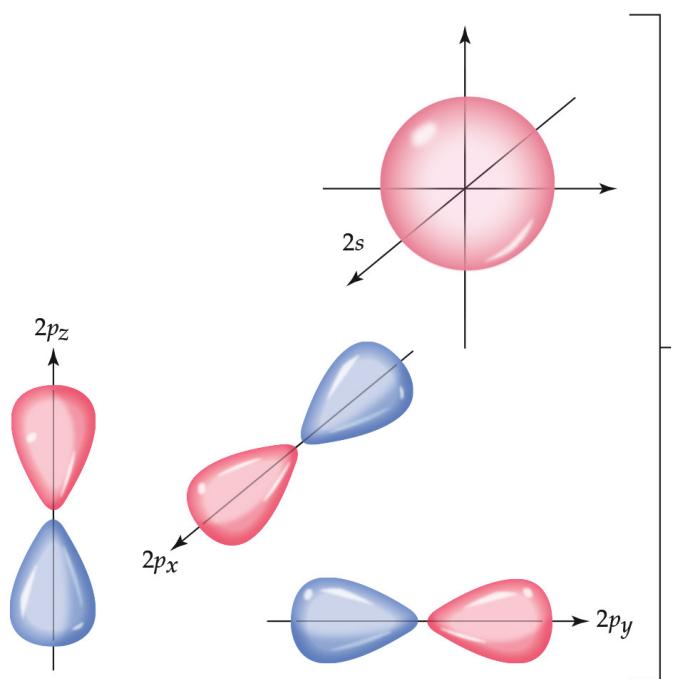
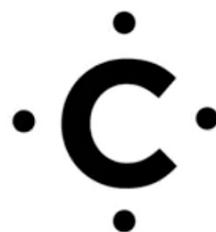
Figuren viser en carbokation og en carbanion. Brug VSEPR for at afgøre bindingsvinklerne i kation og anion.



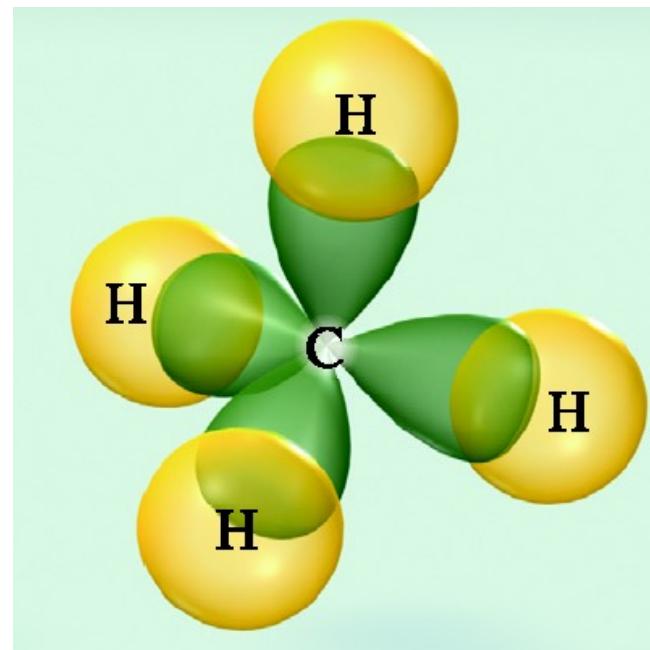
Trigonal planar: 120°
isoelektronisk til BH_3

Tetraedrisk: $\sim 109^\circ$
isoelektronisk til NH_3

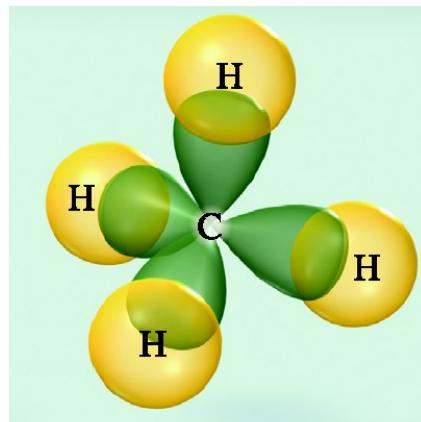
4.2 Orbitaler i Molekyler: Valensbindingsteori (VB)



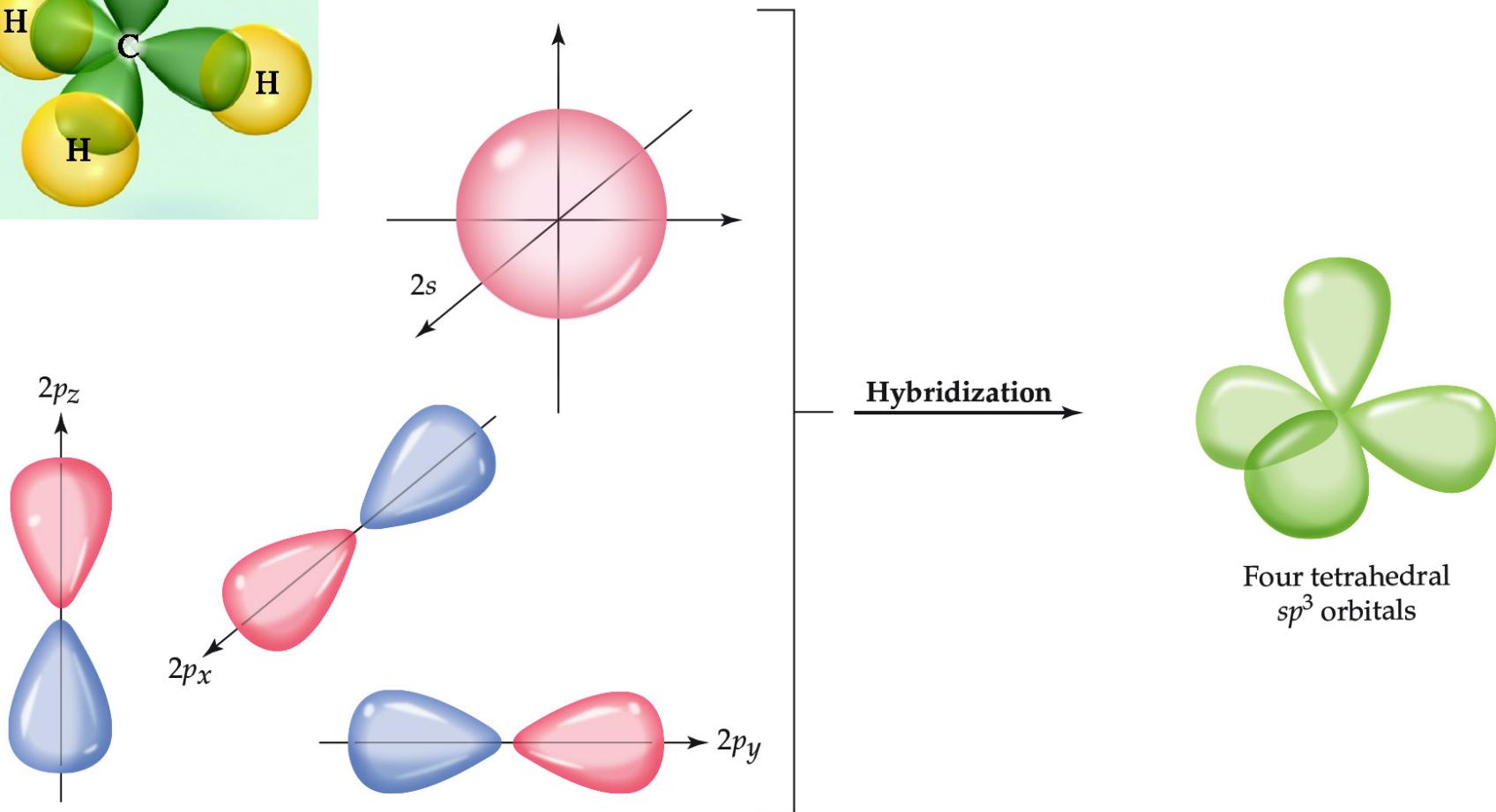
?



Hybridorbitaler har andre strukturer end de rene orbitaler.

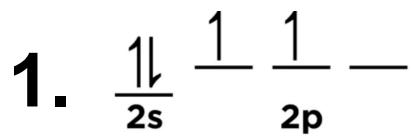


Bland 4 orbitaler til 4 hybrid-orbitaler sp^3

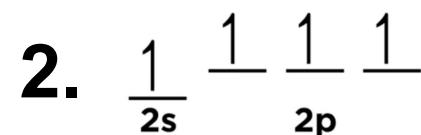


Kovalent binding: to atom-orbitaler overlapper. Sandsynligheden at finde elektronerne er størst mellem kernerne

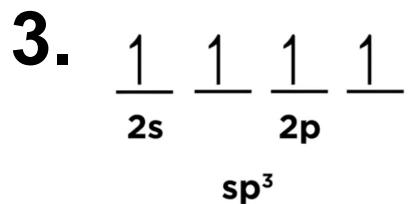
Fire elektrondomæner, de fire s og p orbitaler bruges



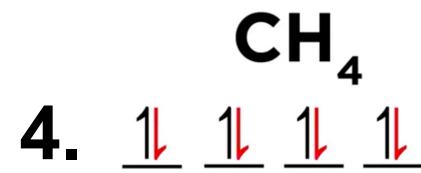
Valenselektronerne
for C



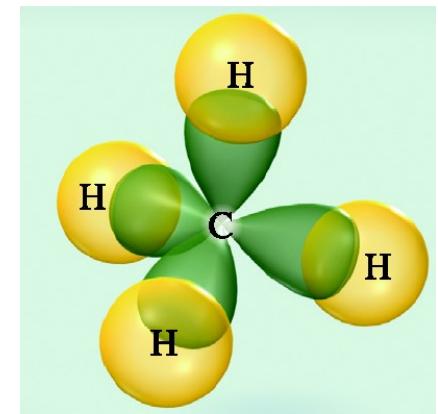
Én elektron løftes



Orbitaler blandes
til nye hybridobitaler

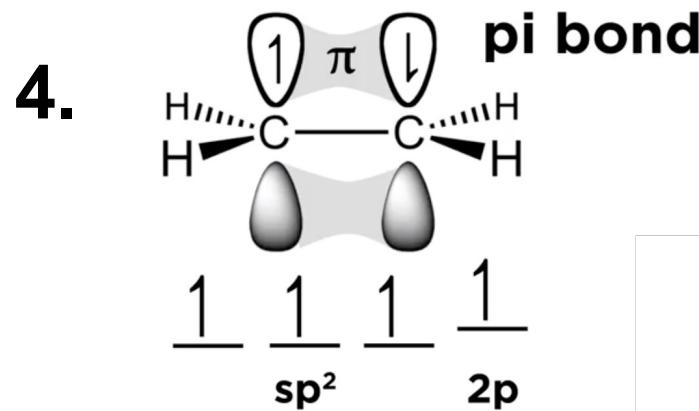
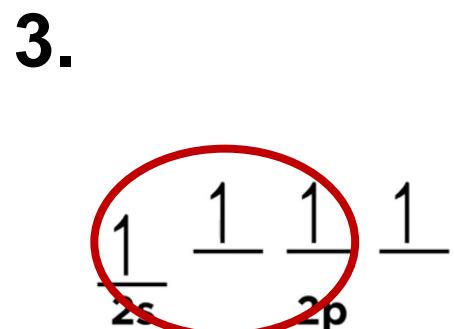
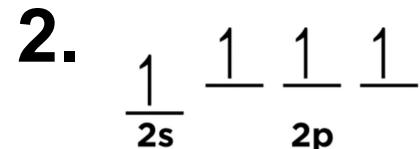
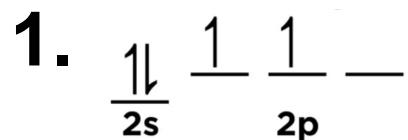


Hybridobitalerne
bruges i binding



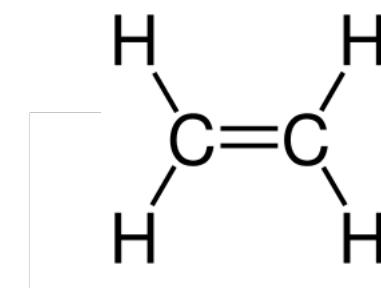
en alkan
(methan)

Tre elektrondomæner: sp^2 hybridorbitaler

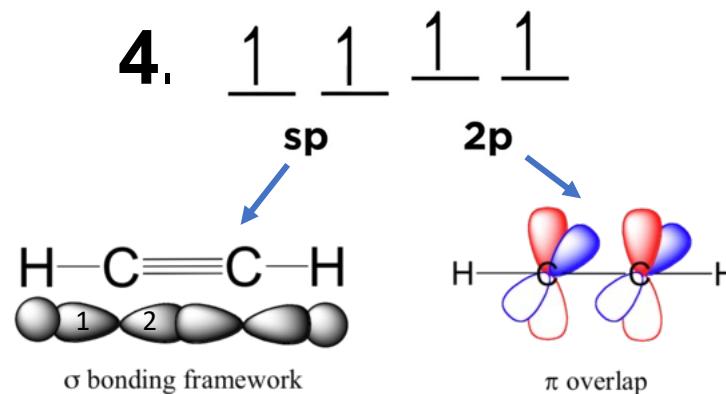
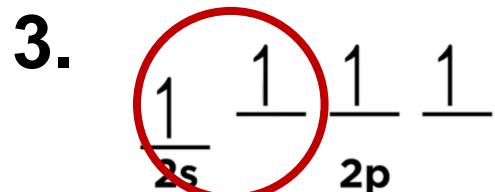
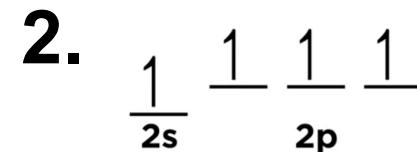
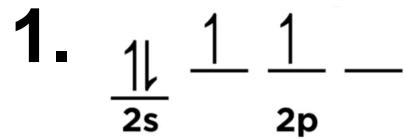


de 3 σ bindinger,
de 3 elektrondomæner

en alken (ethen)
C=C dobbeltbinding



To elektrondomæner: sp hybridorbitaler

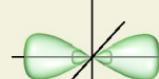


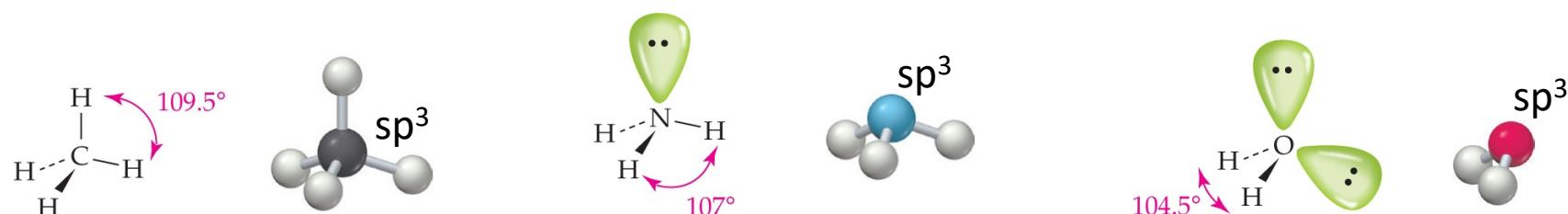
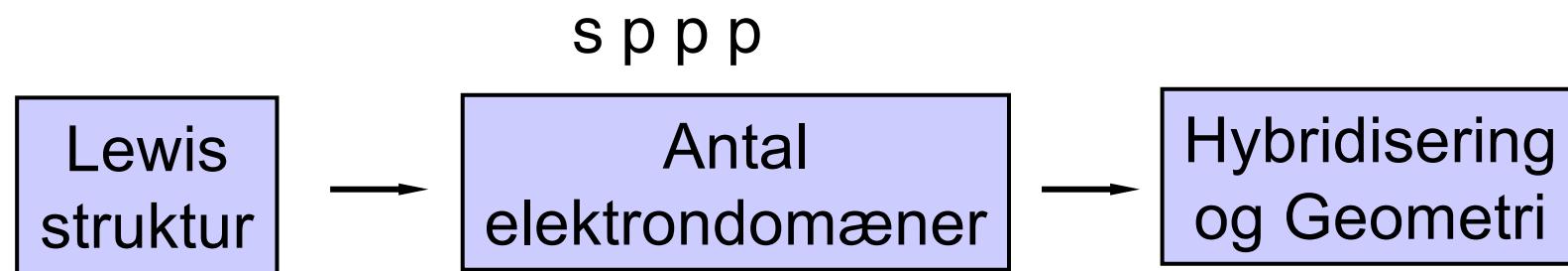
de 2 sp orbitaler

de 2 p orbitaler
laver 2 π -bindinger

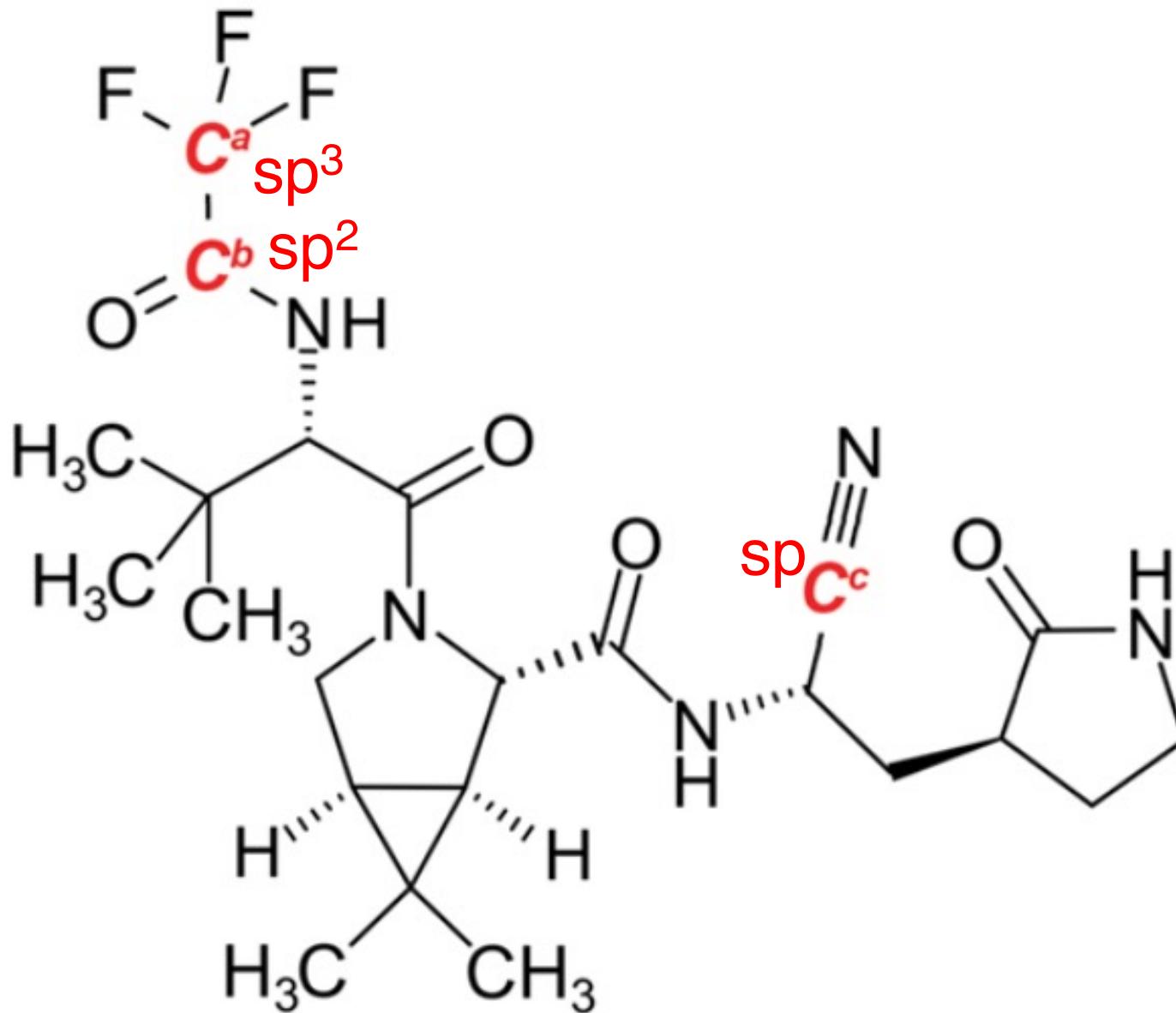
en alkyn (ethyn)
 $C \equiv C$ trippelbinding

Hybridisering og VSEPR: hybridorbitalerne danner elektrondomænerne

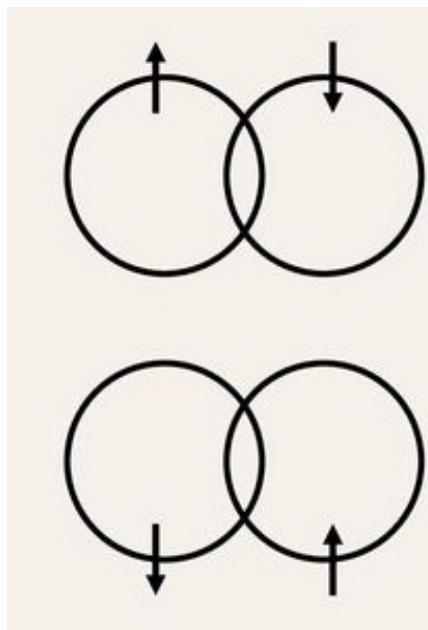
Number of Electron Domains on Central Atom	Hybrid Orbitals	Geometry
2	sp	 Linear
3	sp^2	 Trigonal planar
4	sp^3	 Tetrahedral



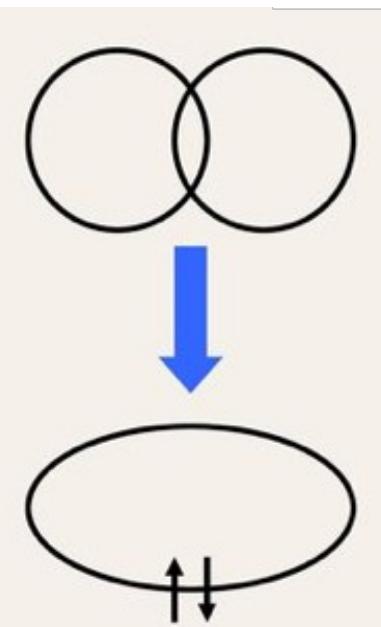
Figuren viser den kemiske struktur af et nyt lægemiddel mod Coronavirus. Hvad er hybridiseringen for kulstofatomerne C^a , C^b og C^c (i figuren fremhævet med rødt)?



VB: hybridorbitaler



MO: molekylorbitaler



fungerer godt til at beskrive 3D struktur og er mere simpel.

fungerer godt til at beskrive magnetiske egenskaber, metaller, ...

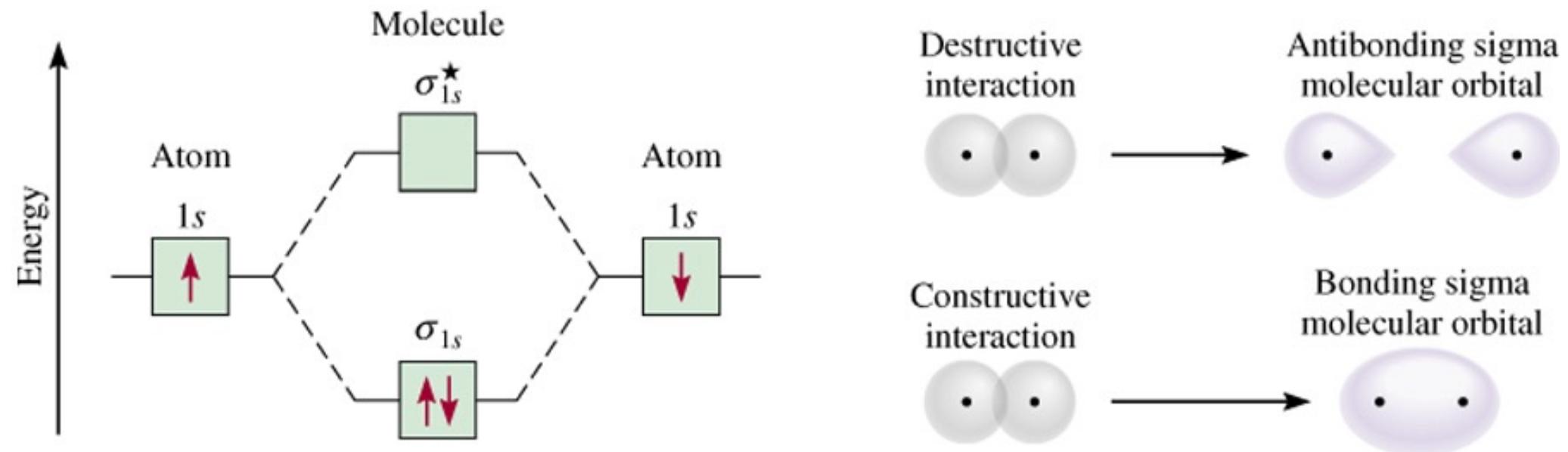
Molekyl-orbitalteori (MO)

Nye orbitaler der er spredt over hele molekylet.

- Antal molekylorbitaler = antal af atomorbitaler som man starter med.
- Orbitaler kombineres hvis orbitalerne er tæt nok på hinanden og har nogenlunde samme energi (f. eks. N₂, O₂, ...)
- Molekylorbitaler fyldes fra lav til høj energi og iflg Hunds regel og beskriver, hvor elektroner sandsynligvis vil være i et molekyle.

En **anti-bindende orbital*** har højere energi end de orbitaler, den blev dannet ud fra og har et knudepunkt mellem atomerne.

*den med stjernen



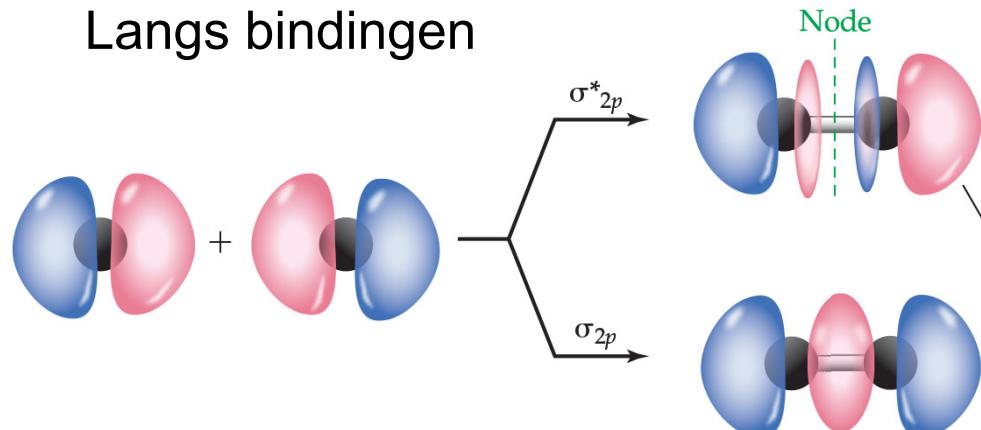
En **bindende orbital** har lavere energi end de orbitaler, den blev dannet ud fra og har elektronndensitet mellem atomerne.

MO-orbitaler i anden periode

3 p orbitaler per atom bliver til 6 p MO-orbitaler

(a)

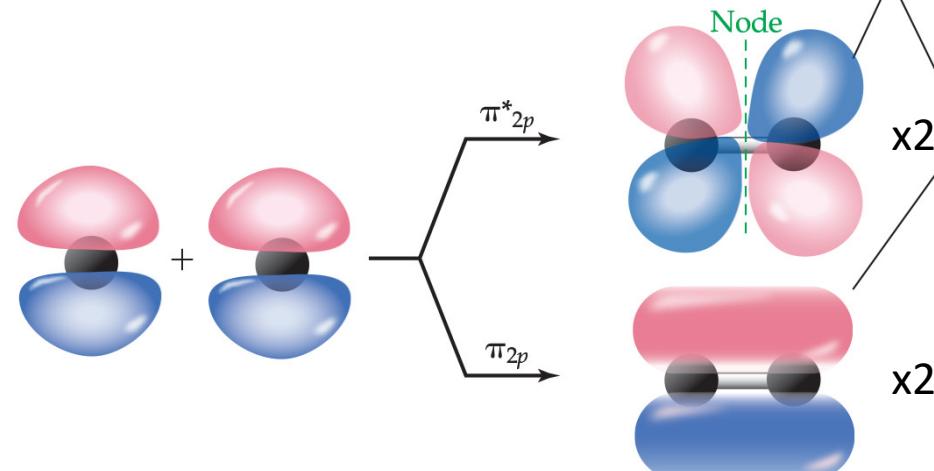
Langs bindingen



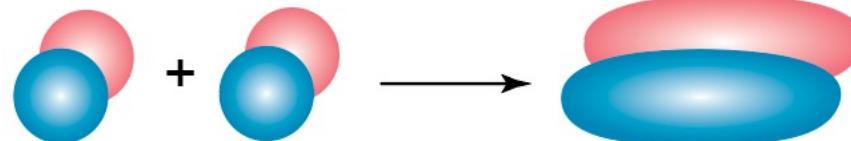
"Antibindende" MO-orbitaler
Skrives med "*"; de har et knudepunkt mellem atomerne

(b)

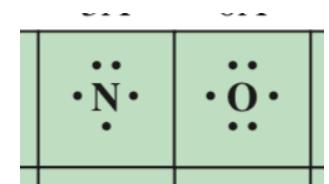
Orthogonal til bindingsaksen



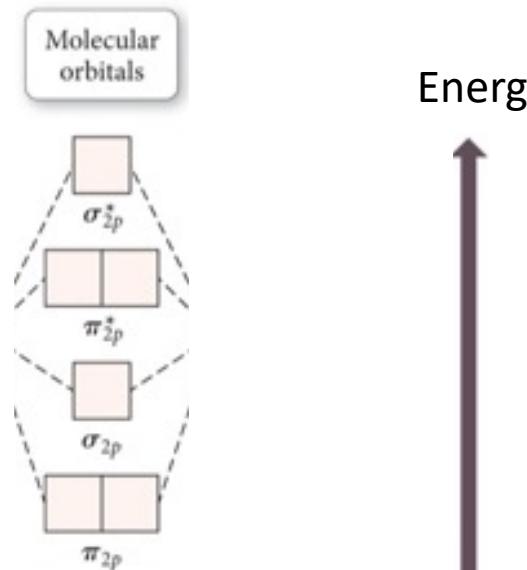
"Bindende" MO-orbitaler
klistrer atomer sammen, der er øget elektron-densitet mellem atomerne



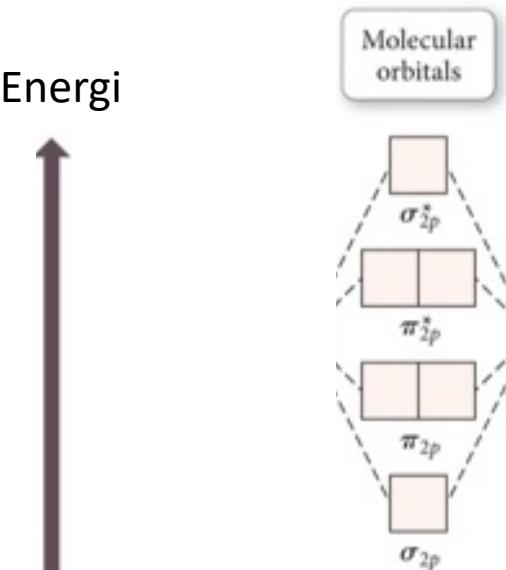
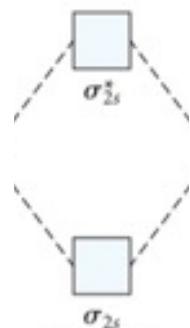
Hvordan opfyldes molekylorbitaler for N₂ og O₂?



6 stk fra 2 gange
tre 2p orbitaler



2 stk fra 2 gange
én 2s orbital



Li₂, Be₂, B₂, C₂, N₂ og deres ioner

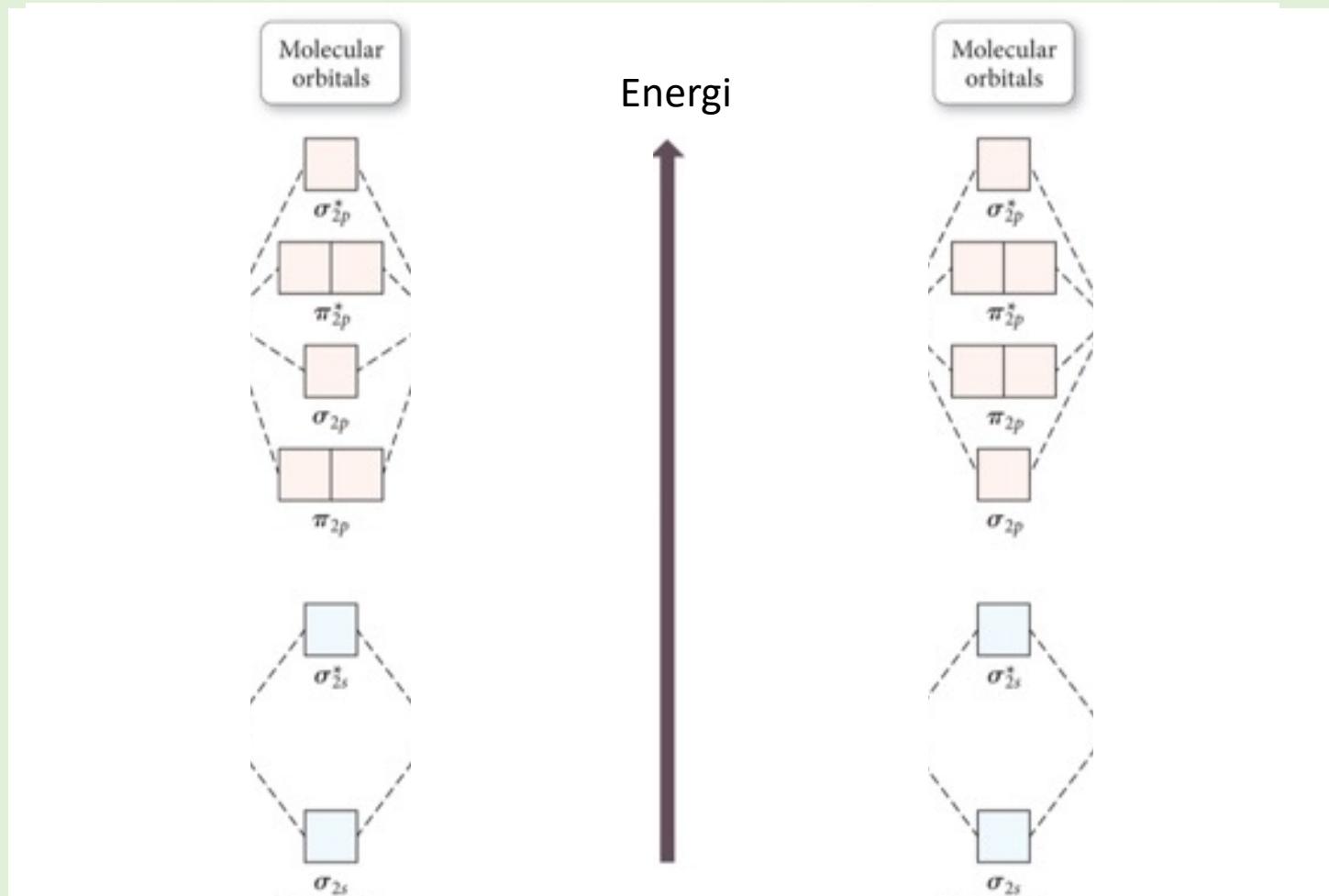
σ_{2s} orbital og σ_{2p} orbital interagerer
og dette skubber σ_{2p} op i energi

O₂, F₂, Ne₂ og deres ioner

Angiv om C_2^{2-} er stabilt og om det er paramagnetisk*

6 stk fra 2 gange
tre 2p orbitaler

2 stk fra 2 gange
én 2s orbital



Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 og deres ioner

Hvor mange valenselektroner er der i C_2 , hvor mange i C_2^{2-} ?

Hvordan fyldes valenselektronerne fra C_2^{2-} I molekylorbitalerne?

*uparrede elektroner; hvis der kun er parrede elektroner: diamagnetisk

Bindingsorden

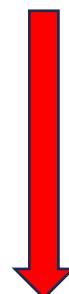
$$= \frac{(\# \text{ bonding } e^- - \# \text{ antibonding } e^-)}{2}$$

bindingsorden 0 svarer til at molekylet ikke er "stabilt"
(dvs ikke detekterbar; f eks He_2 , Ne_2)

Enkeltbinding = bindingsorden 1

Dobbeltbinding = bindingsorden 2

Tripelbinding = bindingsorden 3



Stærkere og kortere binding

Bindingsenergi stiger (og bindingslængde falder) fra enkelt- til tripelbinding

Bond	Energy (kJ/mol)	Length (pm)
H—H	436	75
H—F	565	92
C—H	413	109
C—F	485	135
C—C	347	154
C=C	614	134
C≡C	839	120
C—N	305	143
C=N	615	138
C≡N	891	116
C—O	358	143
C=O	745	120
C≡O	1072	113

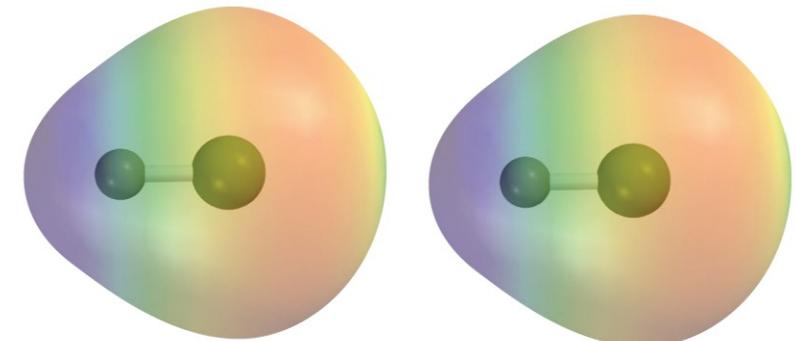
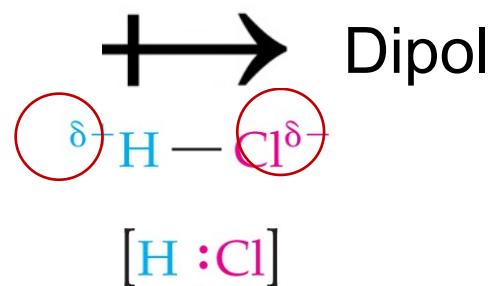
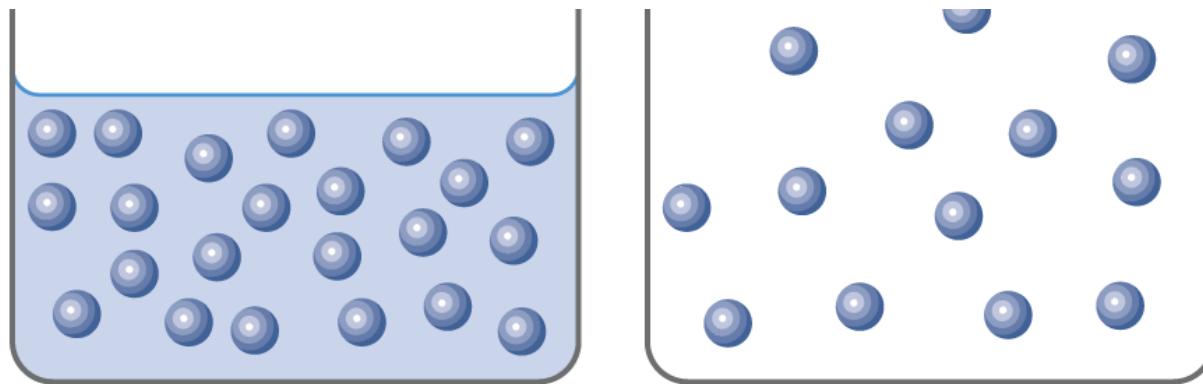
N≡N er den stærkeste binding mellem 2 ens atomer: 941 kJ/mol.

C≡O bindingen er med 1072 kJ/mol den stærkeste vi kender.

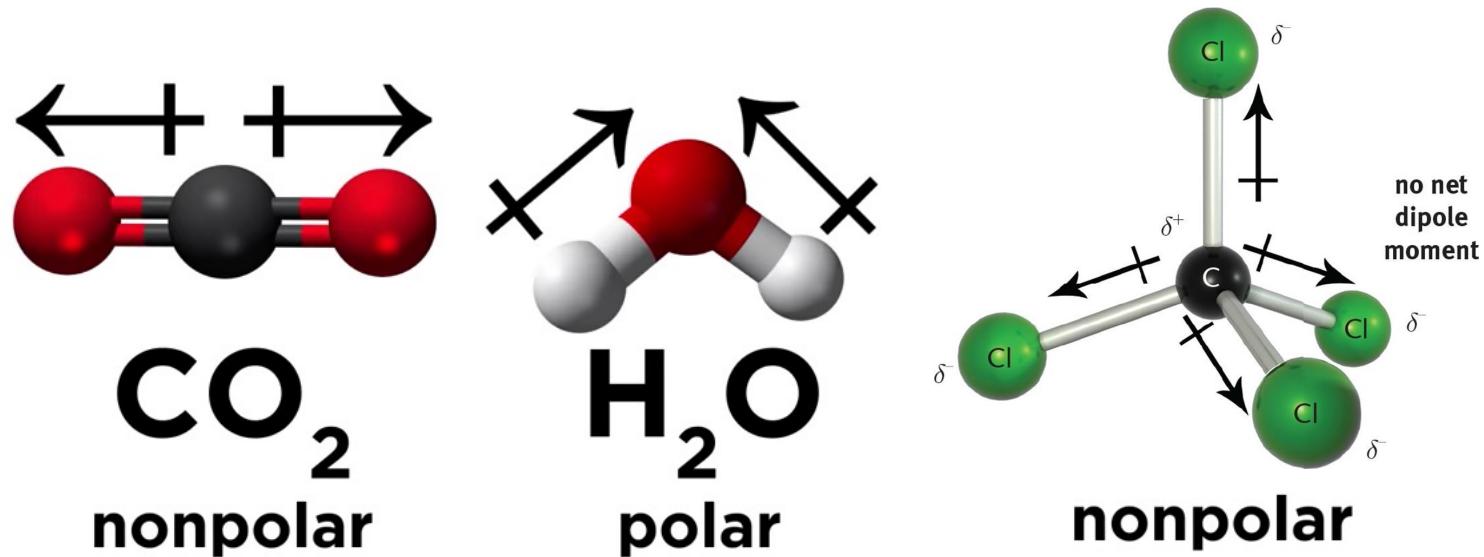
Bindingsenergi stiger med bindingspolaritet, se C=C vs C=O

4.3 Intermolekylære kræfter (mellem partikler)

Kogepunkt er en indikation for intermolekylære kræfter.



Bemærk: ikke alle molekyler med polære bindinger er også polære molekyler

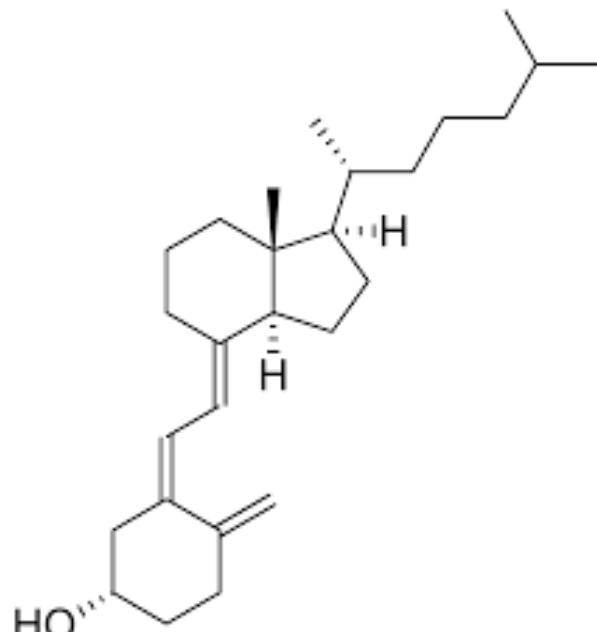
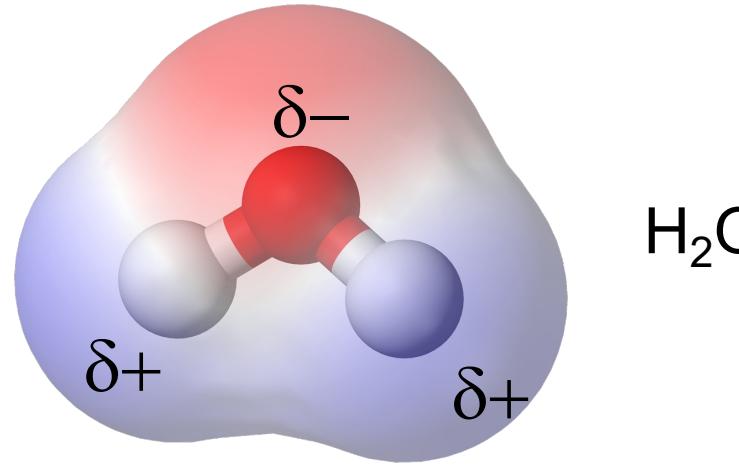


Dipolerne i det lineære CO₂ og tetraedriske CCl₄ molekyle annullerer hinanden

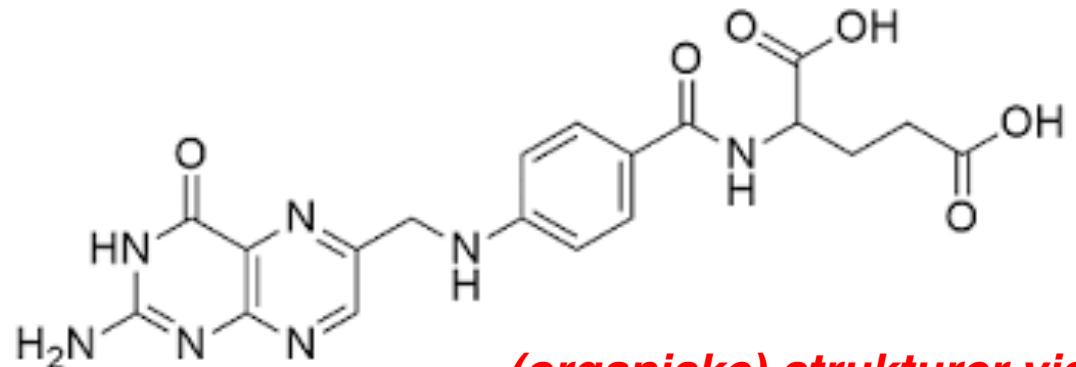
OBS: CH bindinger er ret upolære pga sammenlignelig elektronegativitet

H	C	N	O
2.1	2.5	3.0	3.5

Polære molekyler kan opløses i polære solventer og kaldes for "hydrofil". Ikke-polære molekyler opnødes i ikke-polære solventer (eller væv) og kaldes for "hydrofob".



Vitamin D

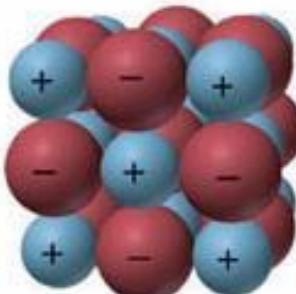


Vitamin B9 Folsyre

*(organiske) strukturer vises
tit uden at man tegner H på;
hjørner uden bogstav er C*

Interaktion (efter faldende styrke)

Ionic



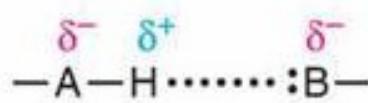
Cation–anion

Ion-dipole



Ion charge–
dipole charge

H bond



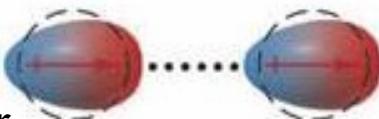
Polar bond to H–
dipole charge
(high EN of N, O, F)

Dipole-dipole



Dipole charges

(London)
Dispersionskræfter



Polarizable e⁻
clouds

Energi
(kJ/mol)

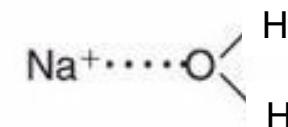
400–4000

Eksempel

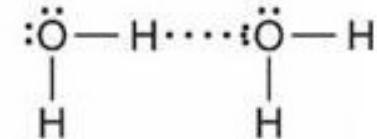
NaCl

Gitterenergi (U):
større hvis ionerne
har større ladning

40–600



10–40



5–25

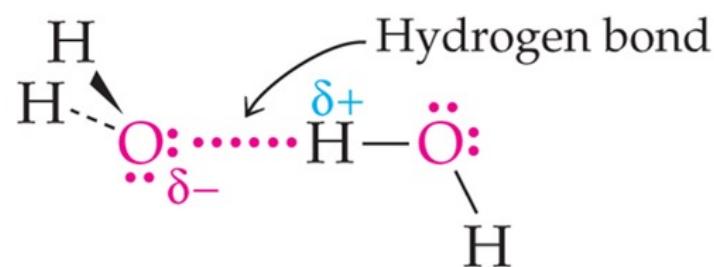


0.05–40



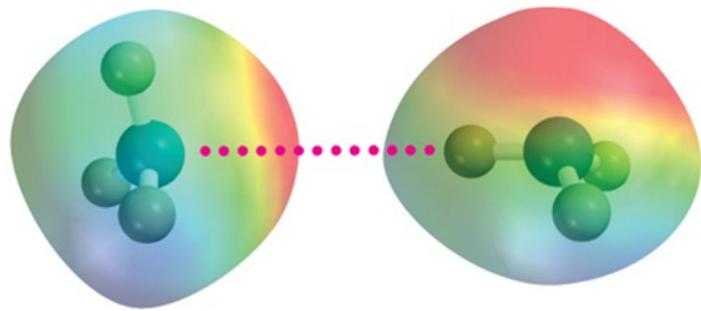
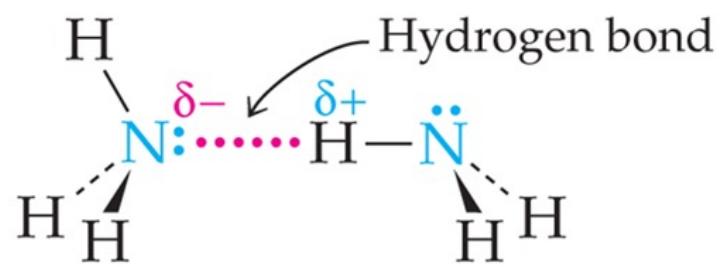
Hvilke kogepunkter forventer vi for NaCl, ICl og F₂?

Hydrogenbinding: En tiltrækkende kraft mellem H bundet til et meget elektronegativt atom (O, N eller F) og et lone pair på et andet elektronegativt atom



Water

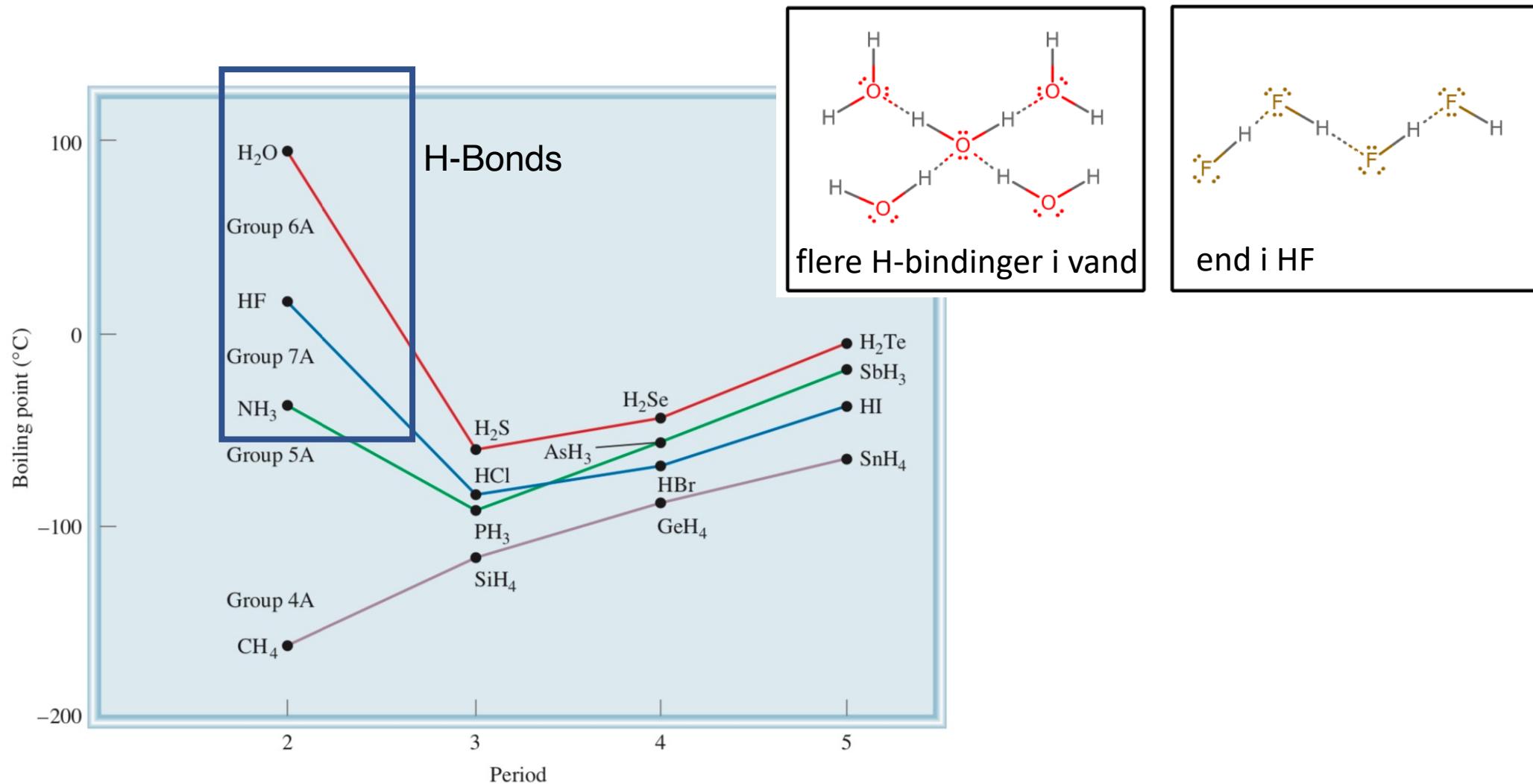
H-acceptor



Ammonia

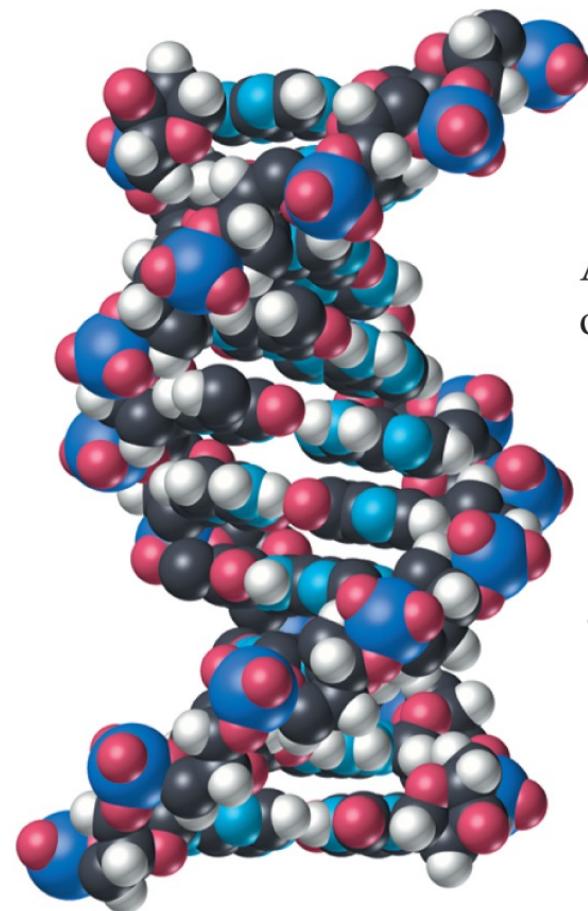
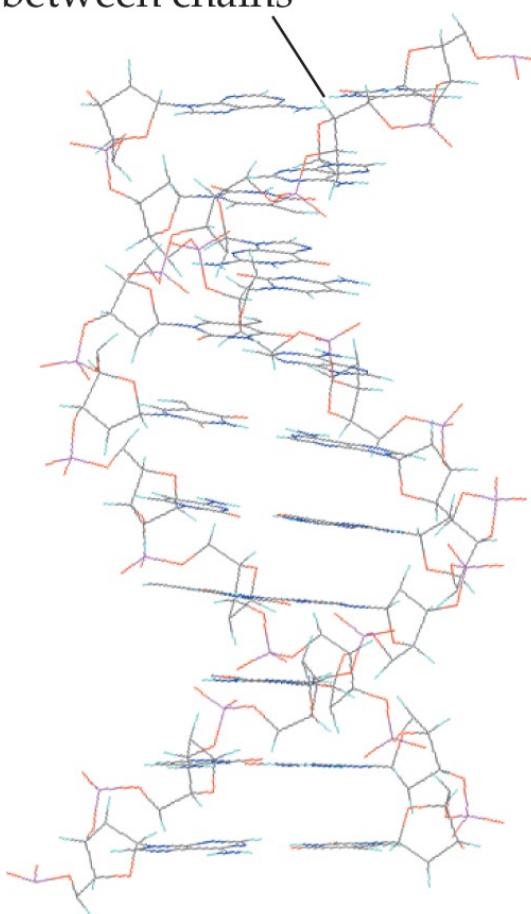
H-donor

Uden hydrogenbinding ville vand koge ved -100°C.

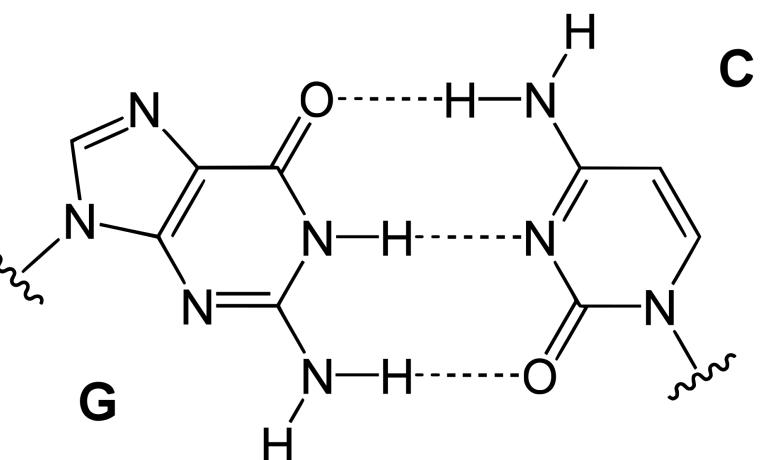


Stærke nok til at lave strukturer; svage nok for at kunne åbnes (f eks replikation af DNA)

Hydrogen bond
between chains

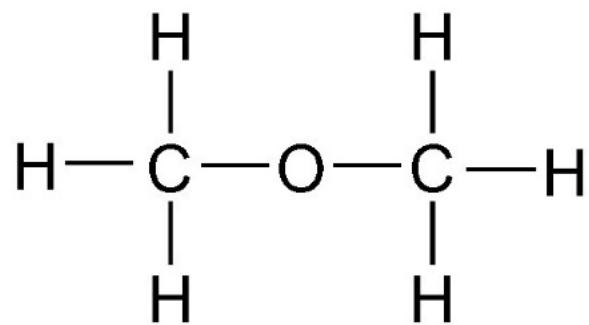


A short segment
of DNA



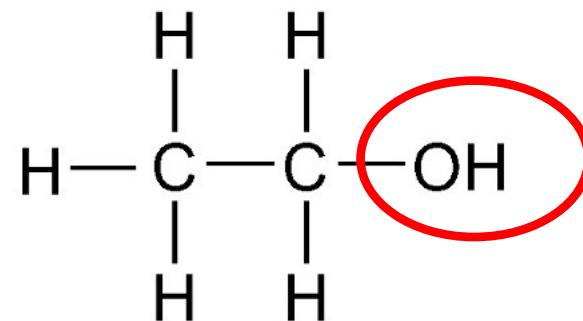
Hydrogenbinding: En tiltrækkende kraft mellem **H bundet til et meget elektronegativt atom** (O, N eller F) og et lone pair på et andet elektronegativt atom

Ethanol og dimethylether har begge sumformel C₂H₆O (er "isomere").
Hvilket molekyle har det højeste kogepunkt og hvorfor?



Dimethyl Ether

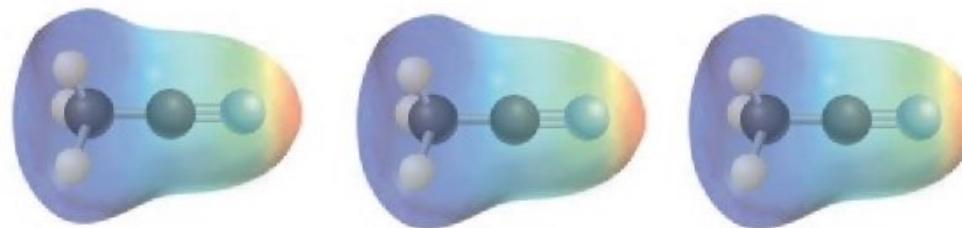
-24 °C



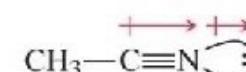
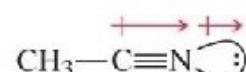
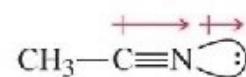
Ethanol

78 °C

Dipol – Dipol kræfter: elektriske interaktioner mellem dipoler på nabo-molekyler



CH_3CN (acetonitril)

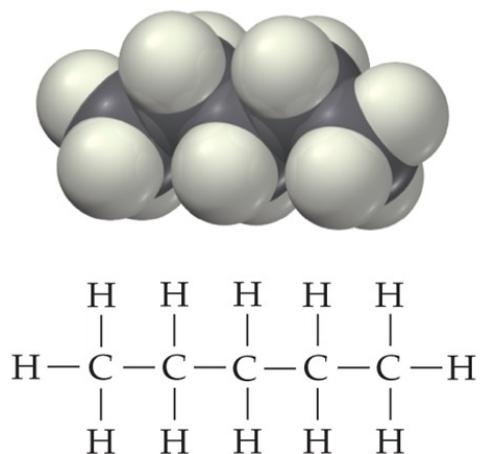


Substance	M_r	Dipolmoment = $Q \times r$	Kogepunkt (K)
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$	44.10	0.08 D	231
CH_3OCH_3	46.07	1.30 D	249
CH_3CN	41.05	3.93 D	355

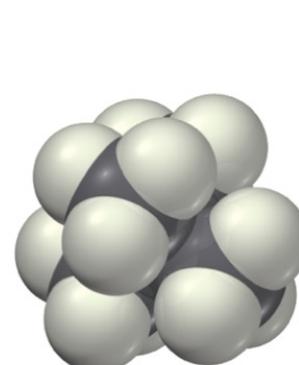
Når dipol-dipol kræfterne stiger, stiger kogepunktet
(næsten samme molmasse)

Dispersionskræfter opstår, når en tilfældig ulige fordeling inducerer en dipol.

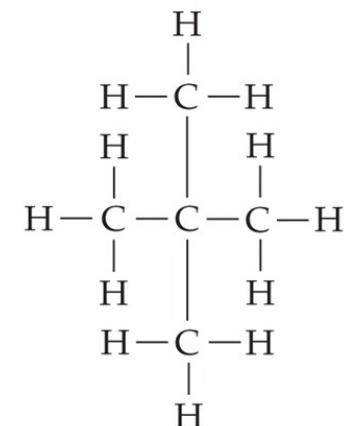
Dette sker nemmere ved større overflade:
større atomer og ikke kompakte former



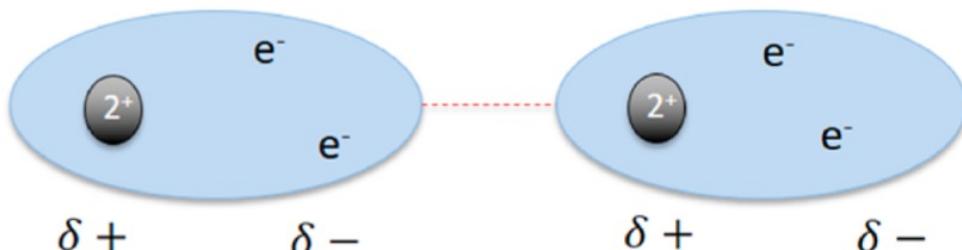
Pentane ($\text{bp} = 309.2 \text{ K}$)



2,2-Dimethylpropane ($\text{bp} = 282.6 \text{ K}$)



Helium har det laveste kogepunkt på $-269 \text{ }^{\circ}\text{C}$ (4 K).



26050 Kemi for Life Science

- 1 Kemisk regning, periodisk system, navngivning
- 2 Reaktioner
- 3 Elektroner, orbitaler og periodiske trends
- 4 Bindinger

5 Energi

- 6 Faste stoffer og oplosninger
- 7 Reaktionskinetik
- 8 Ligevaegt
- 9 Ligevaegtsberegninger
- 10 Drivkraft af kemiske reaktioner
- 11 Kernekemi
- 12 Overgangsmetaller og komplekser
- 13 Organisk og biologisk kemi

*Energi kan genkendes i udførelsen af “arbejde”
(bevæge noget) og i form af varme og lys.*

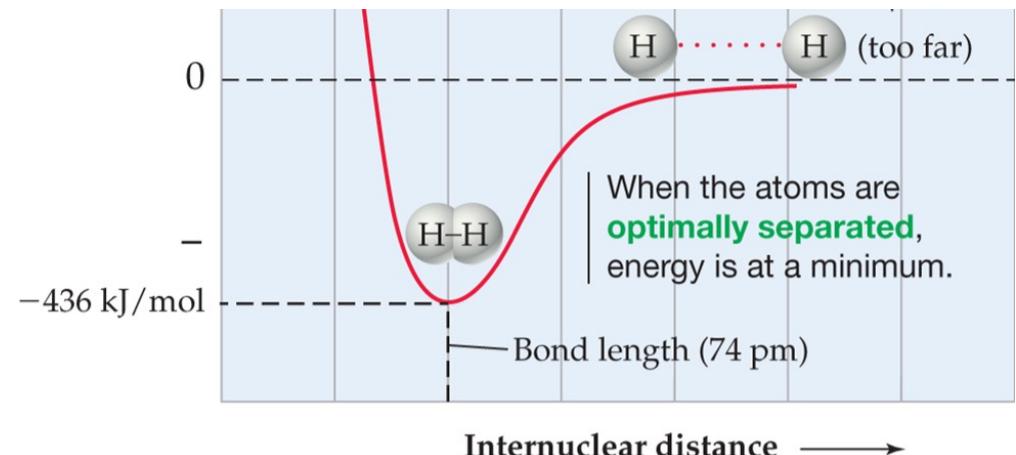
Energi indgår i kemiske reaktioner:

bindinger med forskellige energier dannes og brydes.

Bindingsenergi

positiv værdi
(det kræver energi
at bryde bindinger)

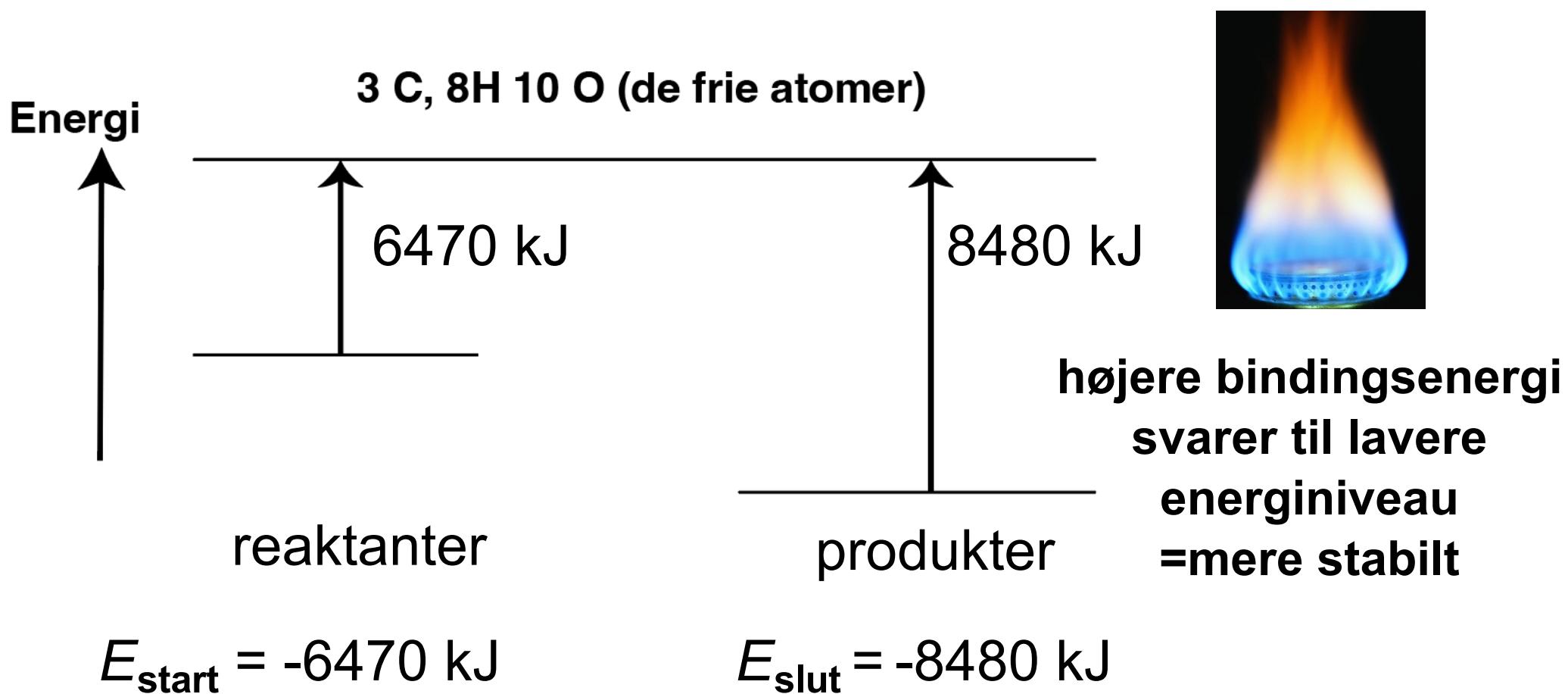
Bond	Energy (kJ/mol)
C—H	413
C—F	485
C—C	347



Høj “bindingsenergi” svarer til lav energiniveau og stabil binding

Energi kan ikke skabes eller ødelægges; den kan kun konverteres fra en form til en anden.

5.1 Energi i kemiske reaktioner



Samlet energi kan ikke nemt måles,
Forandringen i indre energi kan måles



$$\Delta E = E_{\text{slut}} - E_{\text{start}} = -2010 \text{ kJ}$$

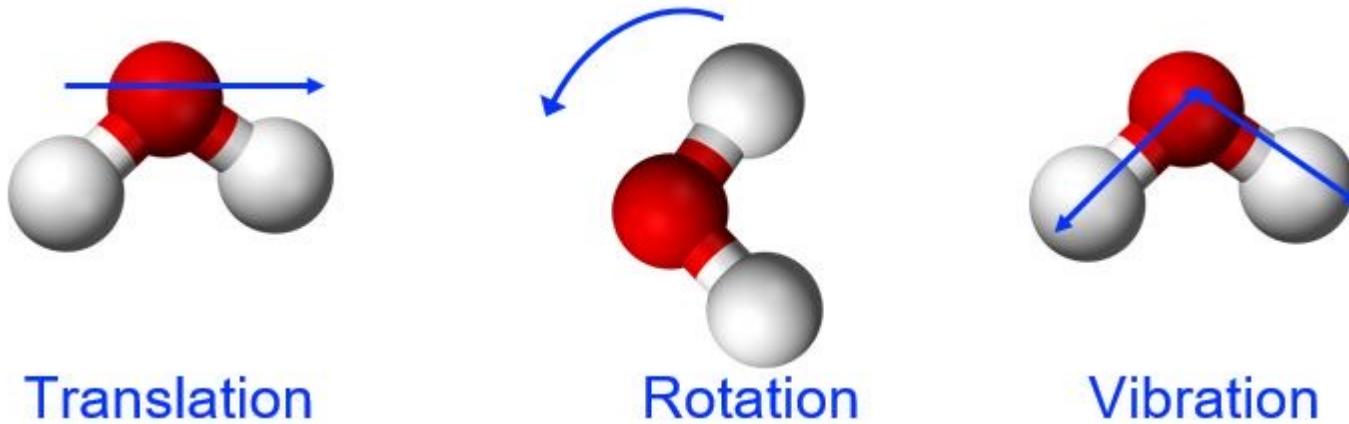
2010 kJ frigives hvis 1 mol propan og 5 mol O₂ omdannes
*andre stofmængder: tag højde for antal mol:
f eks 1 kg propan er ca 23 mol; 23*2010 kJ bliver fri*

Enheden for energi er J (joules)

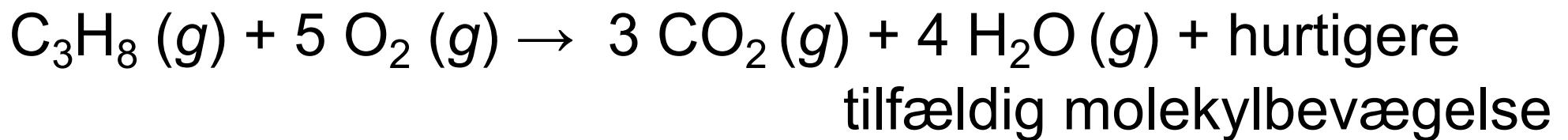
$$\text{Husk } 1 \text{ J} = 1 \frac{\text{kg} * \text{m}^2}{\text{s}^2}$$

418 kJ varmer 1 kg vand med 100 °C (=100 kCal)

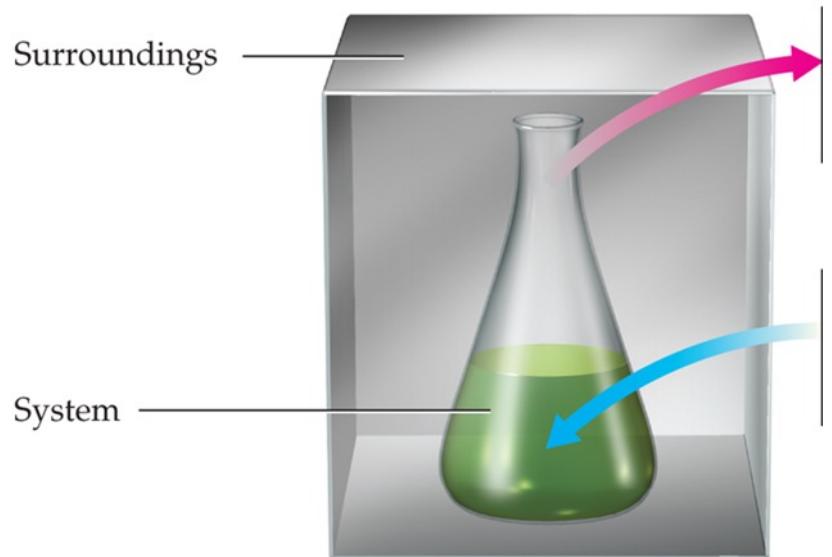
Termisk energi er bevægelsesenergi



hurtigere bevægelse af molekyler = højere temperatur



Den varme der afgives eller optages i en proces der forløber ved konstant tryk P betegnes som entalpiforandring ΔH

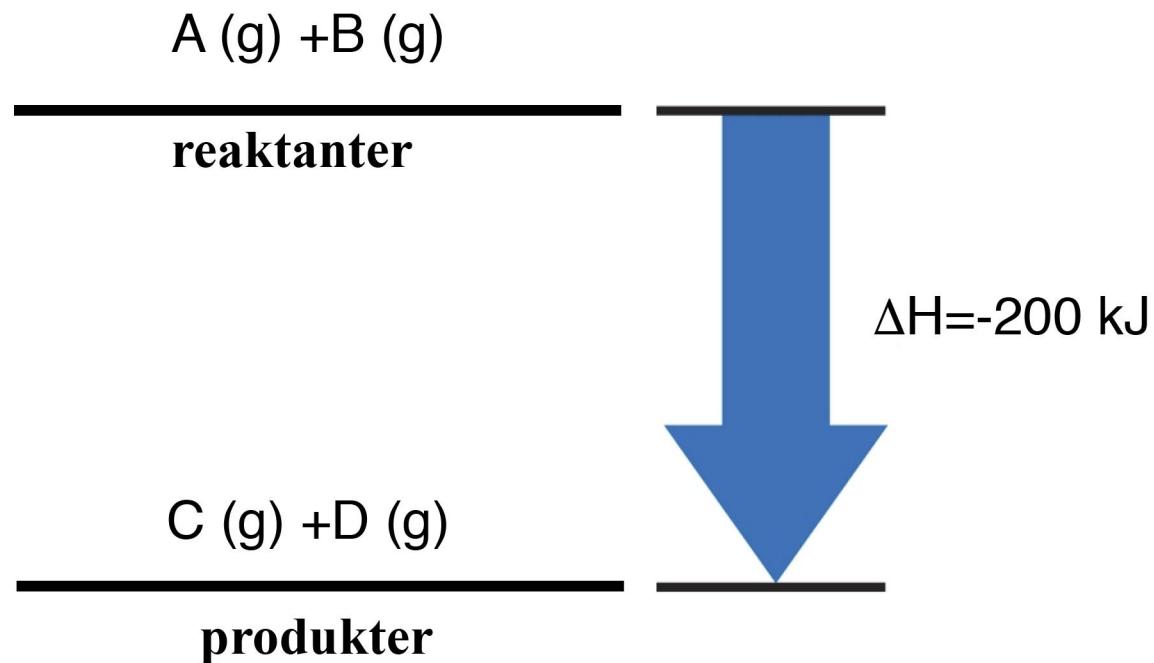


Varme (termisk energi) ud:
exoterm reaktion, $\Delta H < 0$

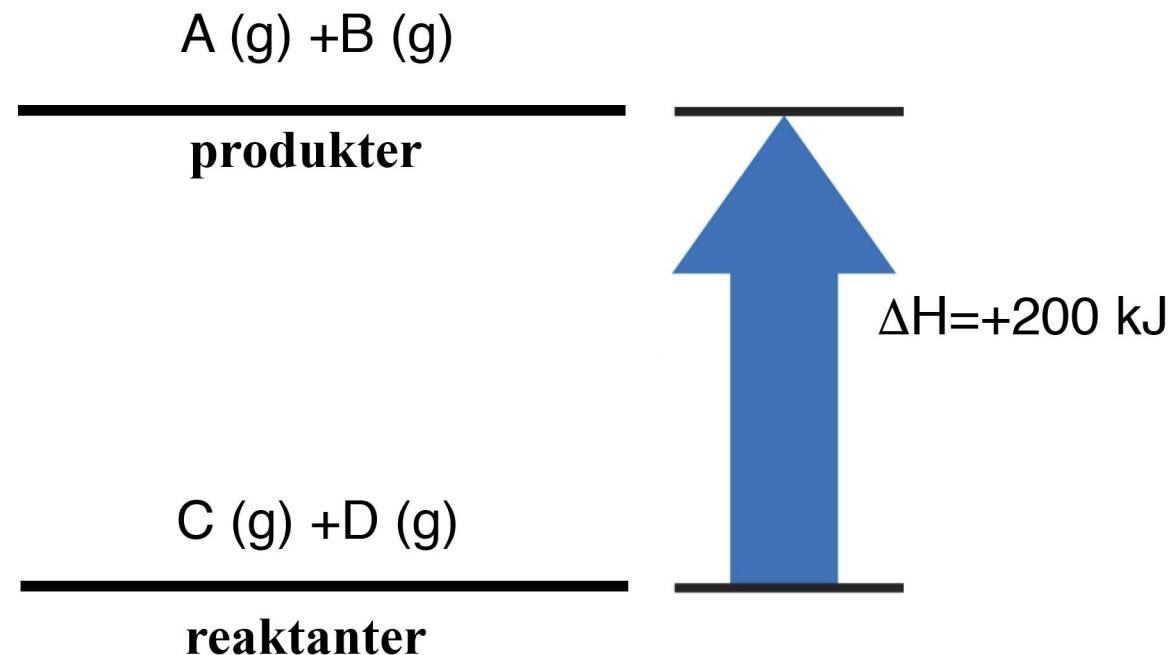
Varme (termisk energi) ind:
endoterm reaktion, $\Delta H > 0$

Forskellen mellem energi E og entalpi H er, at en smule energi E også kan bruges for at "gøre plads" til systemet. Forskellen er lille (og er 0 hvis antal gasmolekyler er uforandret i en reaktion).

Når reaktanter og produkter bytter plads...

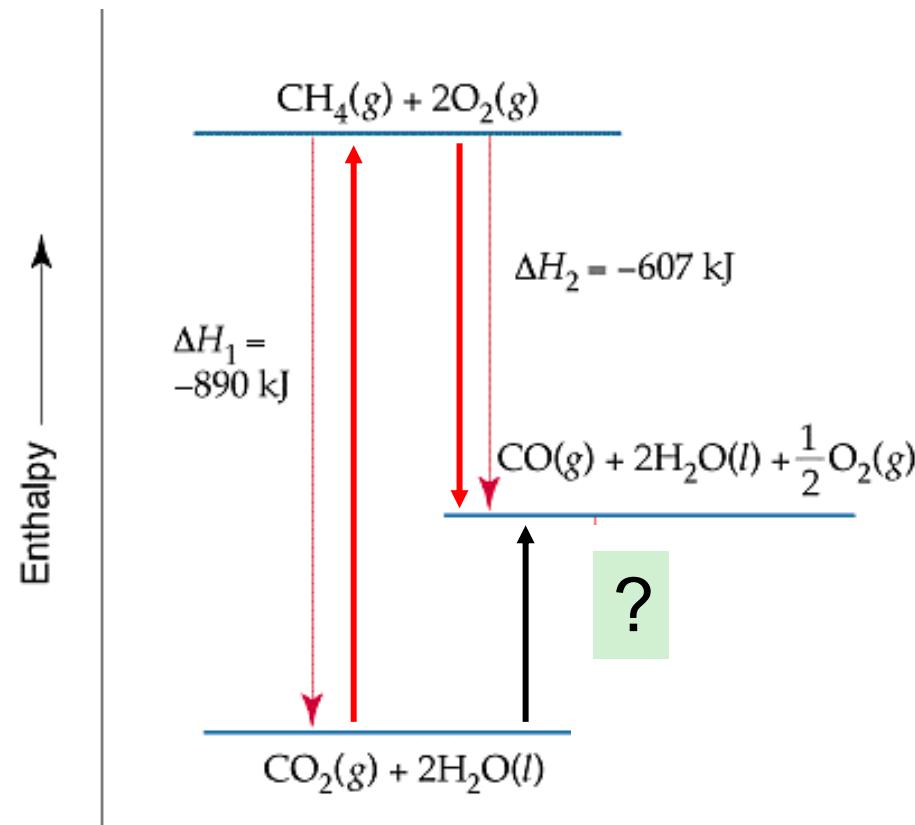


...skifter entalpi (=reaktionsvarmen) tegn



Hvordan kan man beregne reaktionsvarmen?

1. Entalpien for processen kan udregnes fra entalpien for trinene (Hess's lov)



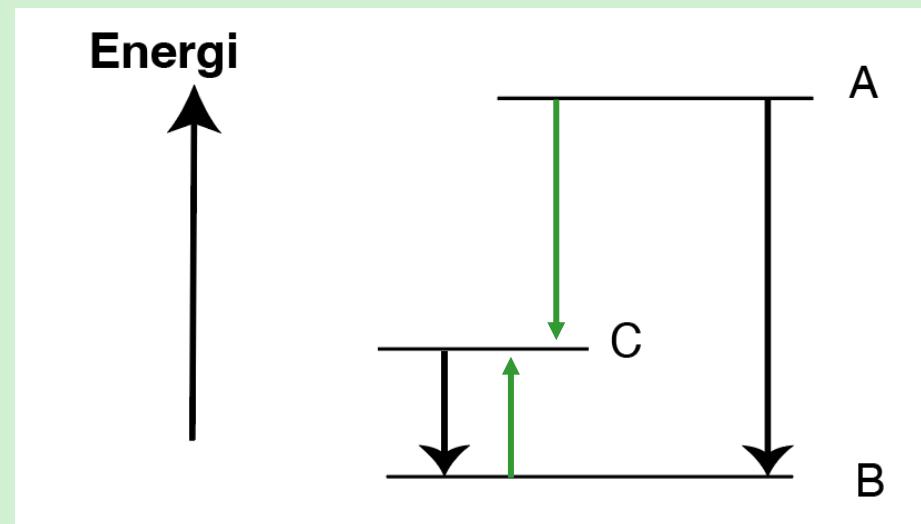
$$? = +890 \text{ kJ} - 607 \text{ kJ} = +283 \text{ kJ}$$

Betrakt følgende hypotetiske reaktioner



Beregn ΔH for reaktionen $A \rightarrow C$.

visuell:



eller: entalpi for $A \rightarrow C$ er summen for $A \rightarrow B$ og $B \rightarrow C$

2. Brug bindingsenergier, som er standard entalpi værdier for at bryde bindinger

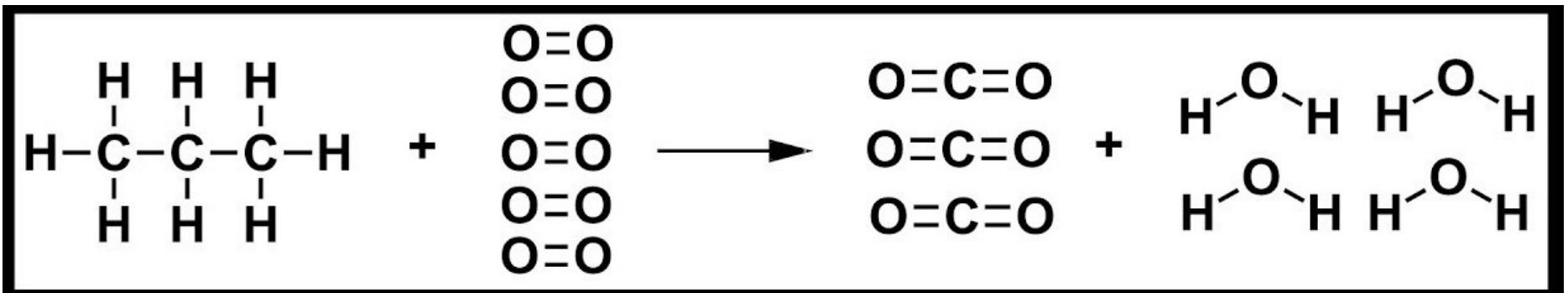
TABLE 9.3 Gennemsnitlig energi for at bryde bindingen, D (kJ/mol)

H—H	436 ^a	C—H	410	N—H	390
H—C	410	C—C	350	N—C	300
H—F	570 ^a	C—F	450	N—F	270
H—Cl	432 ^a	C—Cl	330	N—Cl	200
H—Br	366 ^a	C—Br	270	N—Br	240
H—I	298 ^a	C—I	240	N—N	240
H—N	390	C—N	300	N—O	200
H—O	460	C—O	350	O—H	460
H—S	340	C—S	260	O—C	350
C=C	728				
C=O	800	O=O	498 ^a	N≡N	941

Bindingsenergi stiger med bindingsorden
(se C=C vs C-C)

og bindingspolaritet, se O=O vs C=O

N≡N er den stærkeste binding mellem 2 ens atomer
C≡O bindingen er med 1072 kJ/mol den stærkeste vi kender.



$2 \times 350 \text{ kJ (C-C)}$

$5 \times 498 \text{ kJ}$

$6 \times 800 \text{ kJ}^*$

$8 \times 460 \text{ kJ}$

$8 \times 410 \text{ kJ (C-H)}$

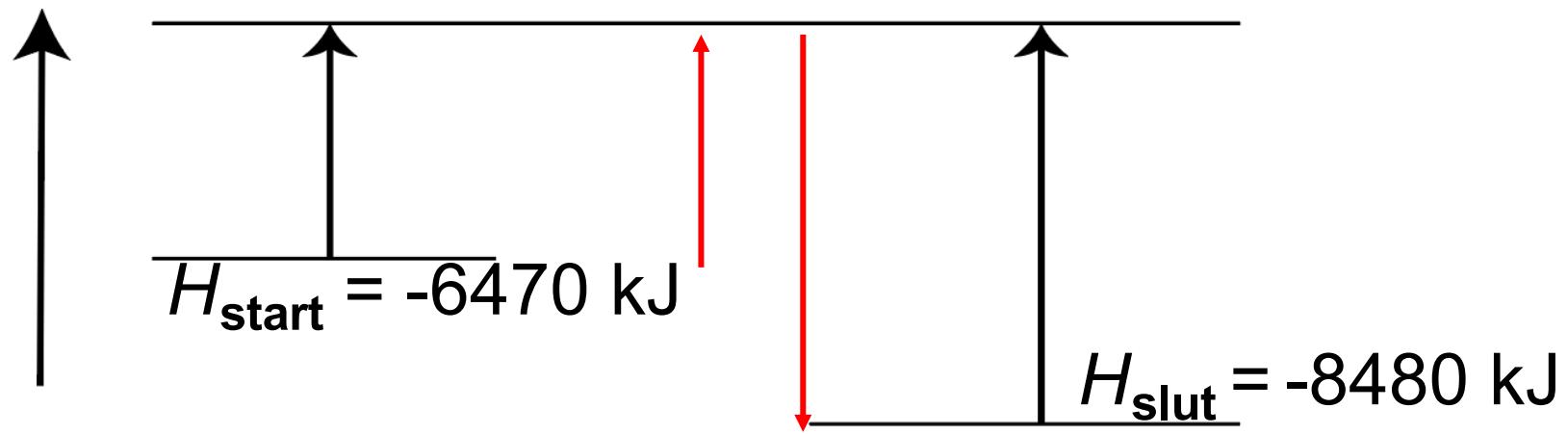
$$D_{(\text{reaktant binder})} = 6470 \text{ kJ}$$

$$D_{(\text{produkt binder})} = 8480 \text{ kJ}$$

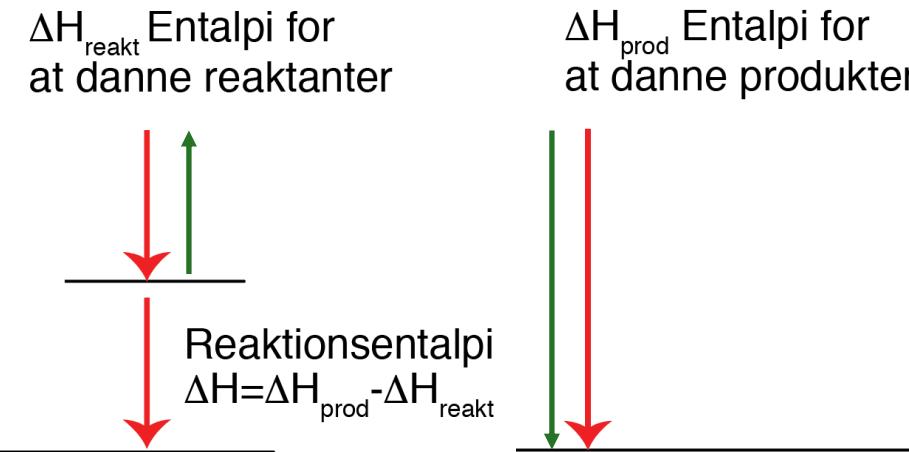
$$\Delta H = H_{\text{slut}} - H_{\text{start}} = D_{(\text{reaktant binder})} - D_{(\text{produkt binder})} = -2010 \text{ kJ}$$

Entalpi

3 C, 8H 10 O (de frie atomer)

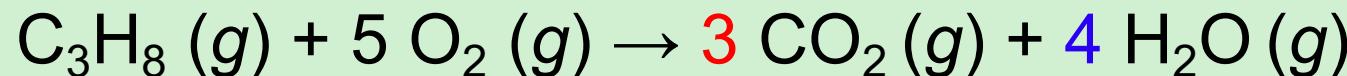


3. Standard dannelsesvarme (ΔH°_f): tabelværdier (Tab. B1&2) for energiindhold af molekyler



$$\Delta H^\circ_{\text{reaction}} = \sum \Delta H^\circ_f (\text{products}) - \sum \Delta H^\circ_f (\text{reactants})$$

(støkiometriske koefficienter indgår)



ΔH°_f	-103,8	0	-413,8	-241,8	kJ/mol
--------------------	--------	---	--------	--------	--------

$$\Delta H^\circ_{\text{reaktion}} = 3 \cdot (-413,8) + 4 \cdot (-241,8) - 1 \cdot (-103,8) \quad \text{kJ/mol}$$

5.2 Hvad gør, at en proces er favorabel?

- a) Reaktionsvarme bliver frigivet til omverden og/eller
- b) "uorden i systemets energi" stiger.



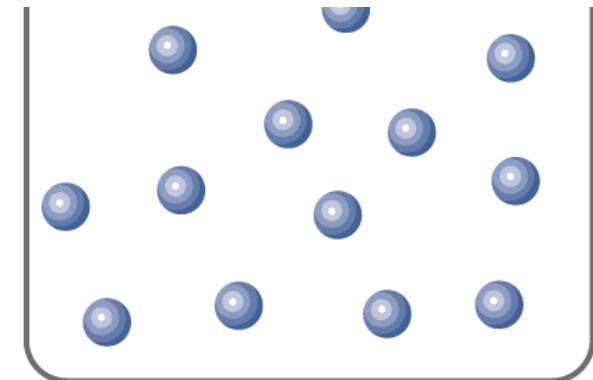
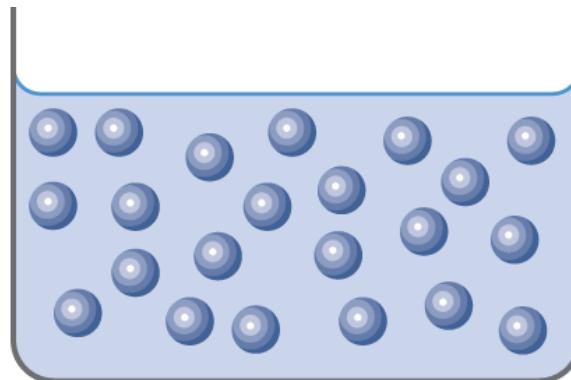
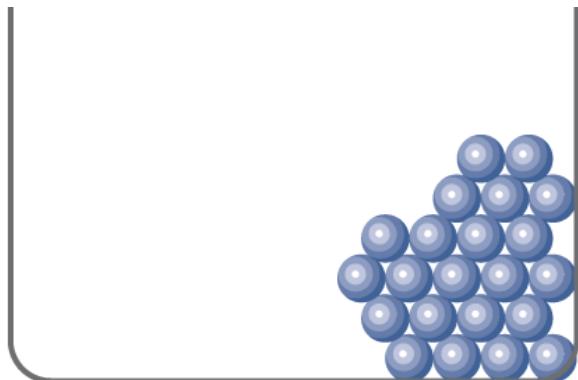
Uorden i systemets energi kaldes for entropi S

Vandmolekyler spredes deres energi til et større volumen, når is smelter eller vand fordamper

fast

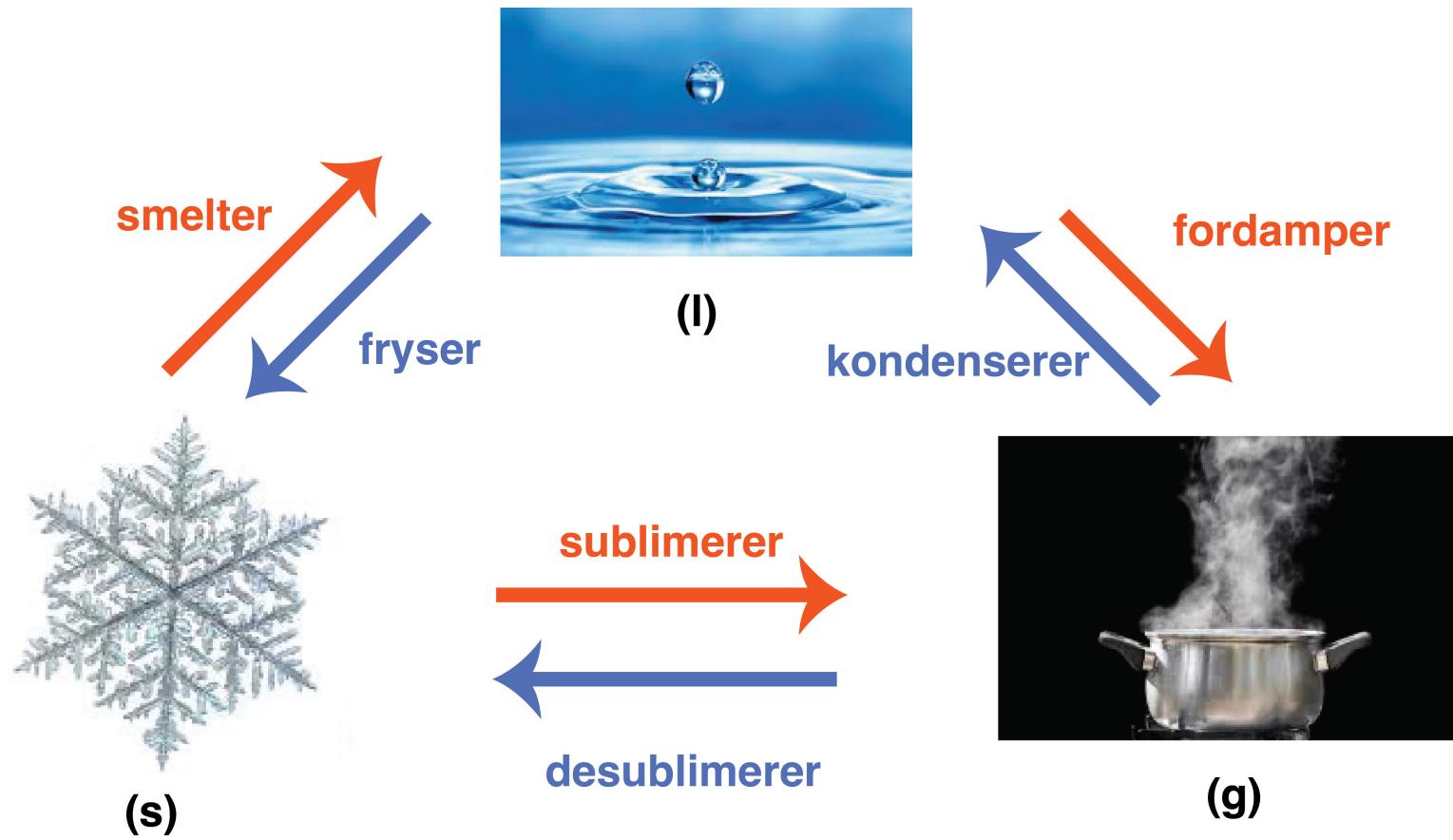
Flydende: bevægeligt
i et komprimeret
volumen

frit bevægeligt i
større volumen



Flere bindinger (H)

Mere uorden (S)



Mere uorden (S) favoriseres ved højere temperatur

Entalpi og entropi kombineres til en størrelse der hedder “Gibbs (Fri) Energi” (G)

ΔG svarer til en drivkraft

$$\Delta G = \Delta H - T \times \Delta S$$

H entalpi, S entropi, T Kelvin-temperatur

$\Delta G < 0$ Processen er spontan.
“exergonisk reaktion”



$\Delta G > 0$ Processen er ikke-spontan; den omvendte proces er spontan.
“endergonisk reaktion”

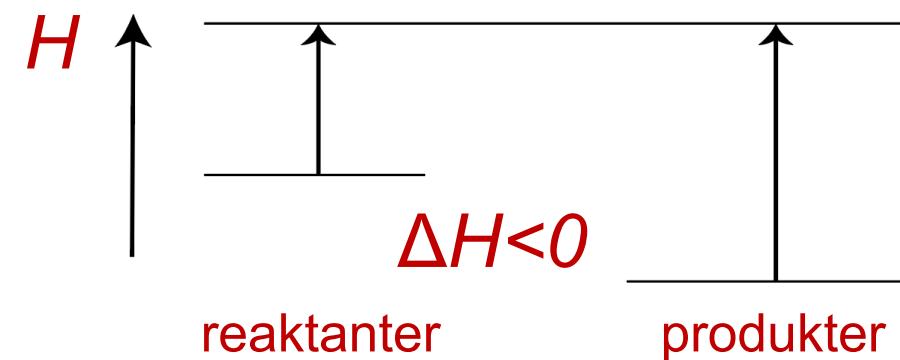
$\Delta G = 0$ Processen er i ligevægt (hverken spontan eller ikke-spontan)

“Spontane” (=favorable) Processer har

$$\Delta G = \Delta H - T \times \Delta S < 0$$

reaktioner, der danner
stærkere bindinger er
favorable ($\Delta H < 0$)

Stigning i uorden driver
spontane reaktioner
($\Delta S > 0$), især hvis T er høj



De fleste favorable processer er exoterme:
 ΔH er tit afgørende.

Entropi stiger normalt når

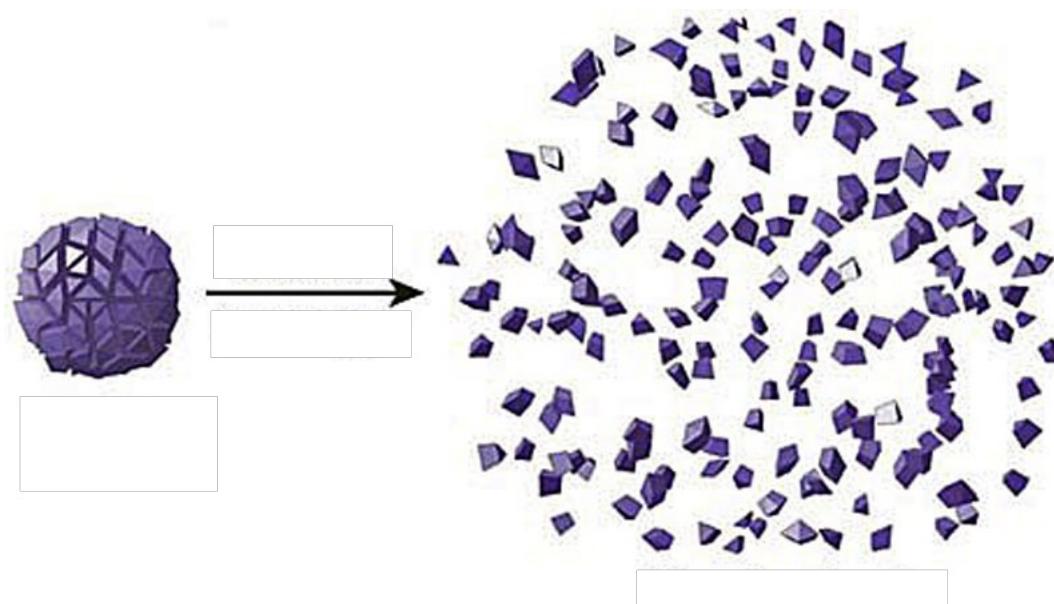
et fast stof bliver til en væske,

en væske bliver til en gas,

et molekyle bliver opdelt i to eller flere mindre molekyler,
fast stof går i oplosning,

eller

en reaktion resulterer i en stigning i antallet af mol gas

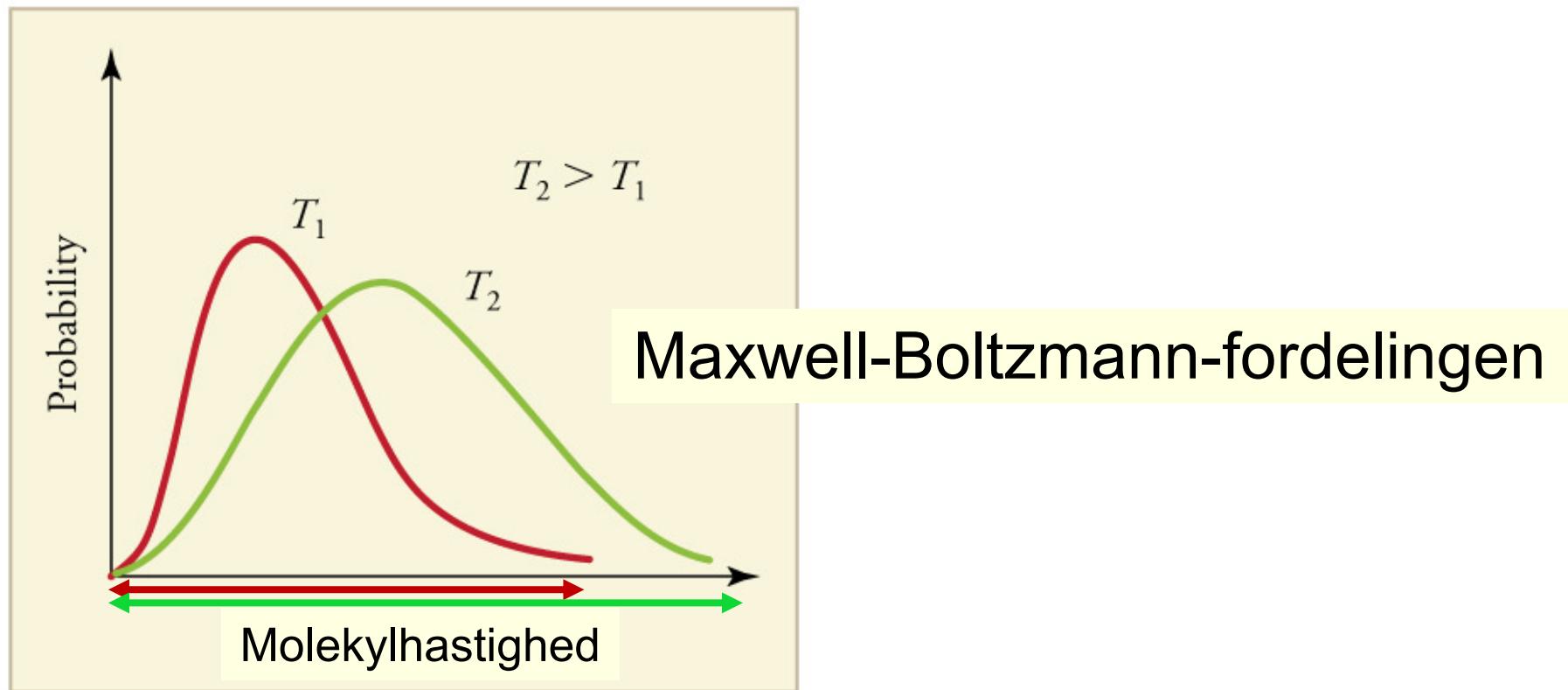


Stiger eller falder entropien?

- a. $\text{CO}_2(s) \rightarrow \text{CO}_2(g)$
- b. $\text{I}_2(g) \rightarrow 2\text{I}(g)$
- c. $\text{CaCO}_3(s) \rightarrow \text{CaO}(s) + \text{CO}_2(g)$
- d. $\text{Ag}^+(aq) + \text{Br}^-(aq) \rightarrow \text{AgBr}(s)$

a-c stiger
d falder

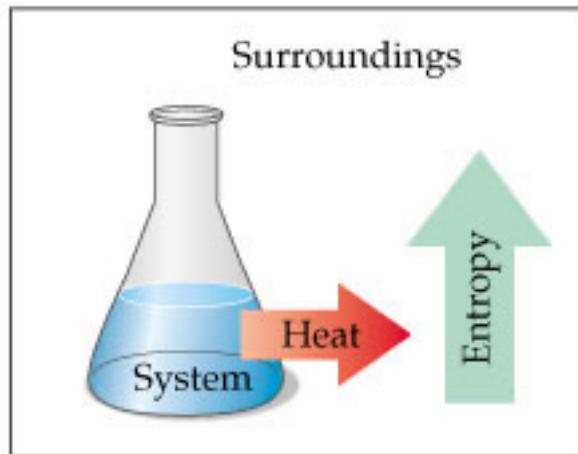
Varme der afgives til omgivelserne
øger dens uorden



Fordeling i energitilstande (entropi) bliver bredere ved højere temperatur.

Den sammenlagte uorden i energi stiger for spontane processer

$$\Delta G = \Delta H - T \times \Delta S_{\text{system}} < 0$$



$$\Delta H = -T \times \Delta S_{\text{surr}}$$

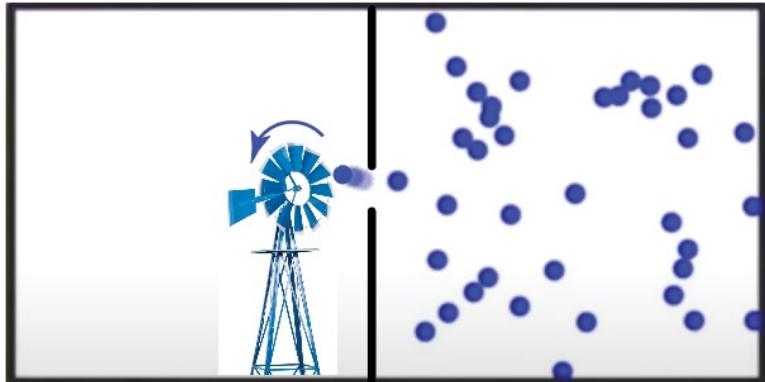
Reaktionsvarme ΔH udløser uorden udenfor systemet.

$$\Delta G = -T \times \Delta S_{\text{surr}} - T \times \Delta S_{\text{system}} = -T \times (\Delta S_{\text{surr}} + \Delta S_{\text{system}}) < 0$$

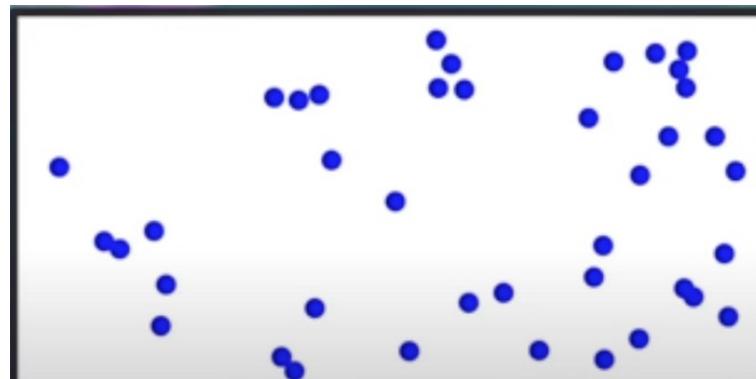
+ +

Sammenlagt: Entropi i universet stiger.

At lave uorden i energi svarer til omdannelse af brugbar energi til mindre brugbar energi



Mere orden (lav entropi)
kan bruges til at udføre arbejde
(nyttig energi)



Mere uorden (S) er mere sandsylig,
men kan ikke bruges til at udføre
arbejde

$$\Delta G = \Delta H - T \times \Delta S$$

$$\Delta H > 0$$

varme optages

$$\Delta H < 0$$

varme afgives

$$\Delta S > 0$$

**Uorden
tager til**

spontan
ved høj nok
temperatur

$$\Delta S < 0$$

**Uorden
tager af**

ikke
spontan

spontan

spontan
ved lav nok
temperatur



En reaktion har $\Delta H = -75 \text{ kJ/mol}$ og $\Delta S = -250 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$. Ved hvilke temperaturer forløber reaktionen spontan?

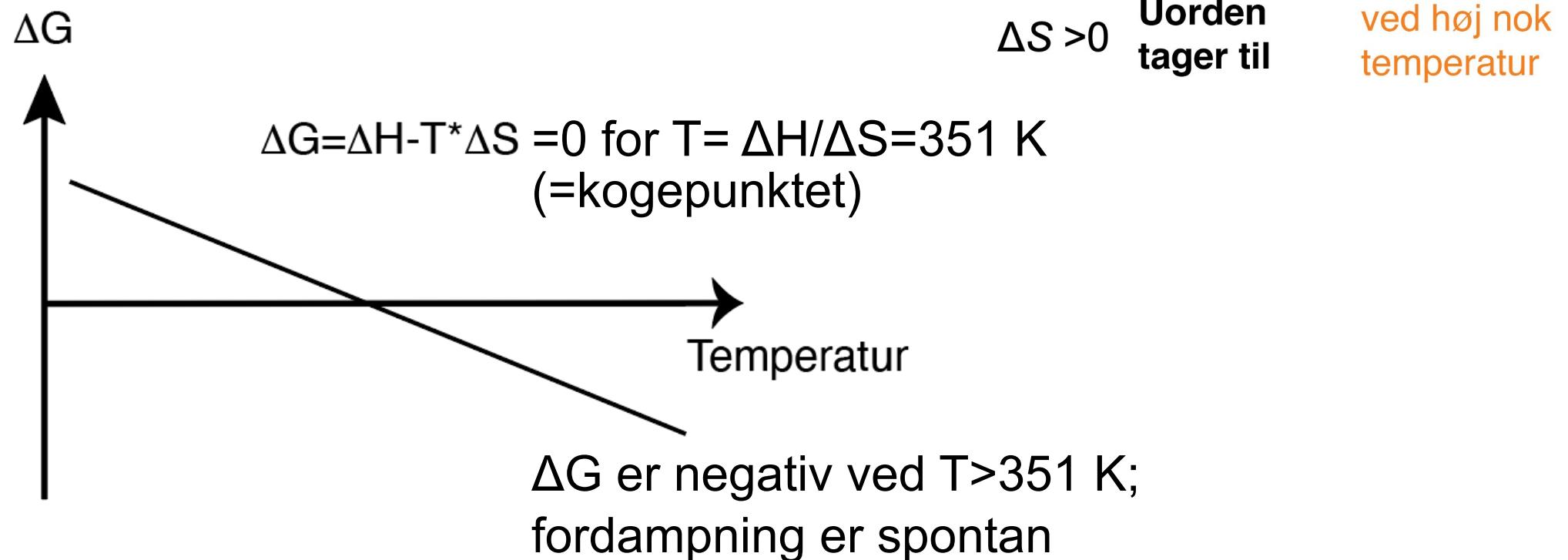
- altid
- aldrig
- over 300 K
- under 300 K

$$\Delta G = \Delta H - T \times \Delta S$$

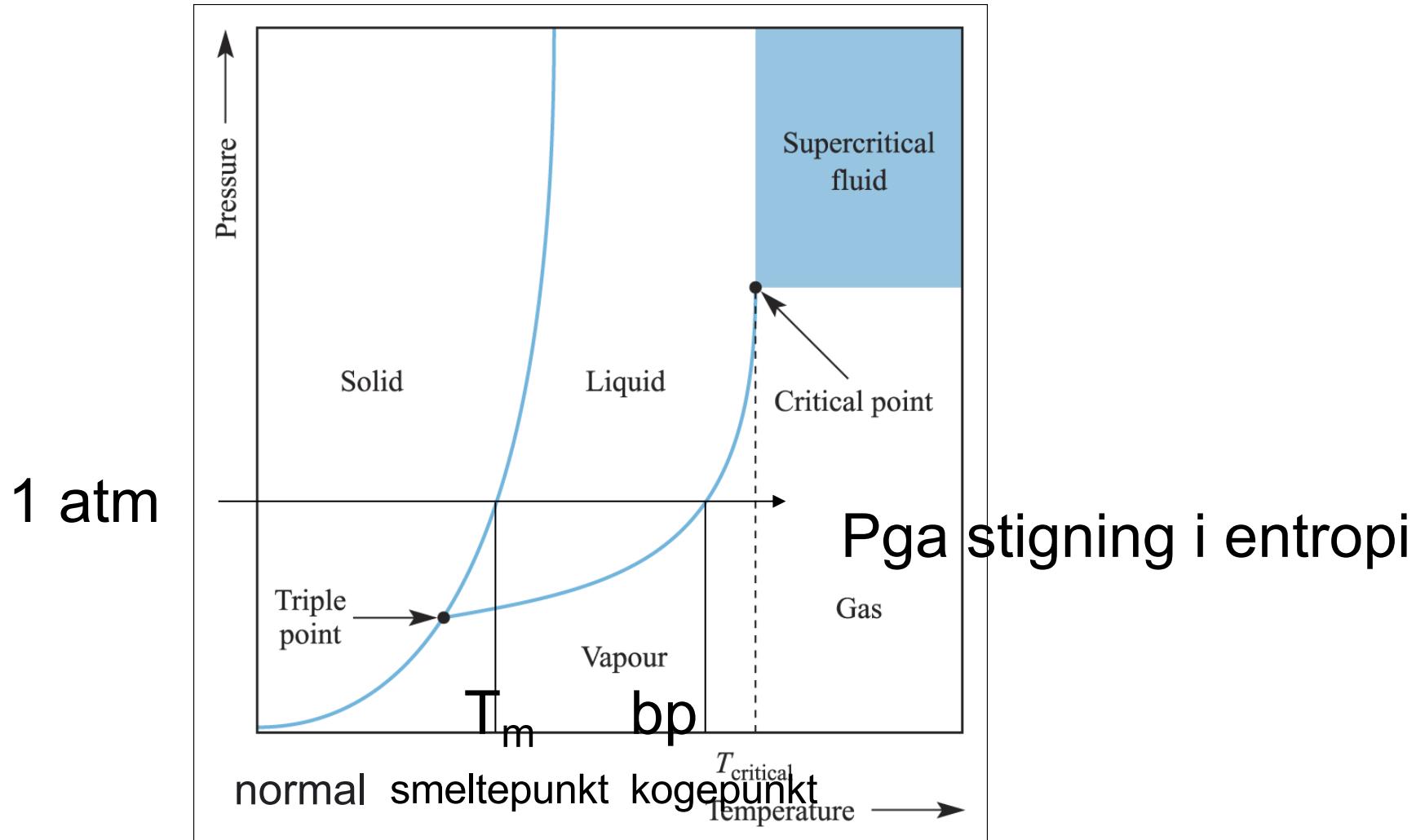
Fordampning af ethanol (væske til gas) ved atmosfæretryk har $\Delta H = 38,6 \text{ kJ/mol}$ og $\Delta S = 110 \text{ J/(mol*K)}$.

Ved hvilken temperatur er ethanol en gas (dvs fordampning er spontan med $\Delta G < 0$)?

$\Delta H > 0$
varme optages



Fasediagram: tilstand af stoffet afhængig af temperatur og tryk



se f eks opgave 11.54

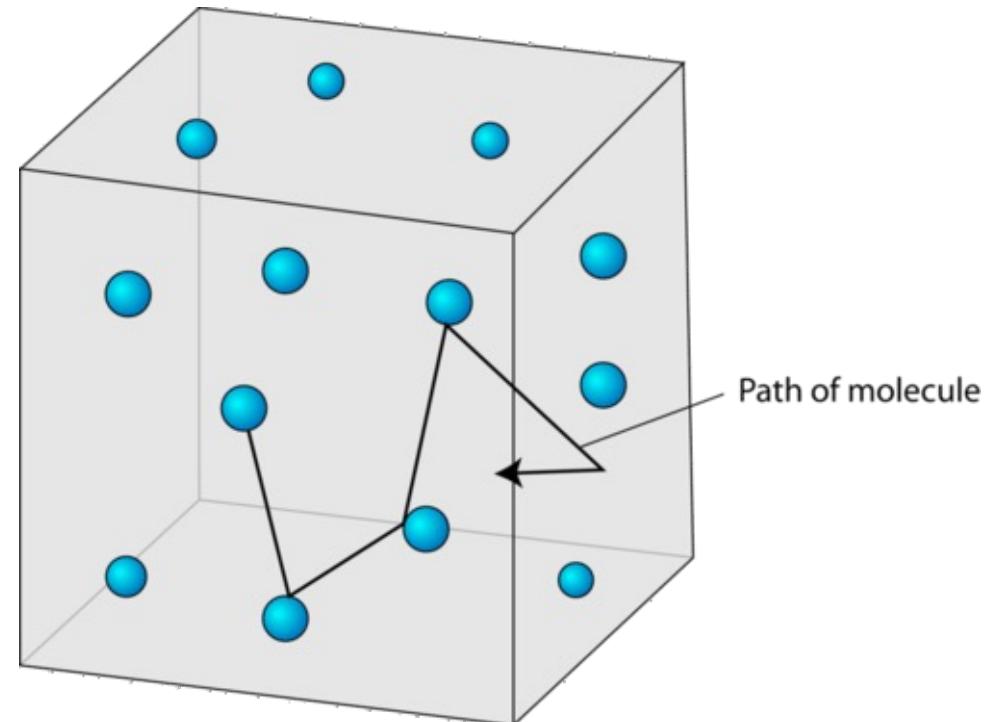
5.3 Ideale gasser og deres egenskaber (ingen interaktion mellem partiklerne og partikelvolumen kan negligeres)

Tryk enheder

$$1 \text{ atm} = 1,01325 \text{ bar}$$

$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2$$



Kinetisk gas teori:

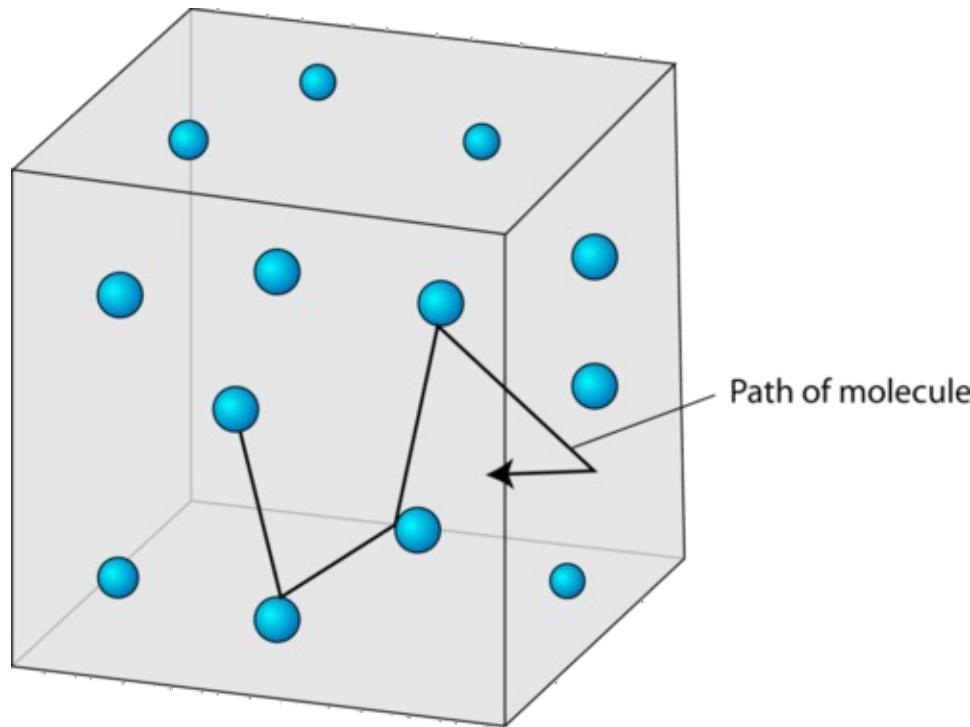
- Partiklerne er i stadig, tilfældig bevægelse
- Gasser er for det meste tomt rum (ca 99,9%).
- Gassens tryk skyldes partiklernes kollision med væggene.
- Molekylhastighed stiger med temperaturen.
- Den gennemsnitlige kinetiske energi er ens for forskellige gasmolekyler (tunge er langsommere).

n = Hvor mange partikler er der?

V = Hvor stor er beholderen?

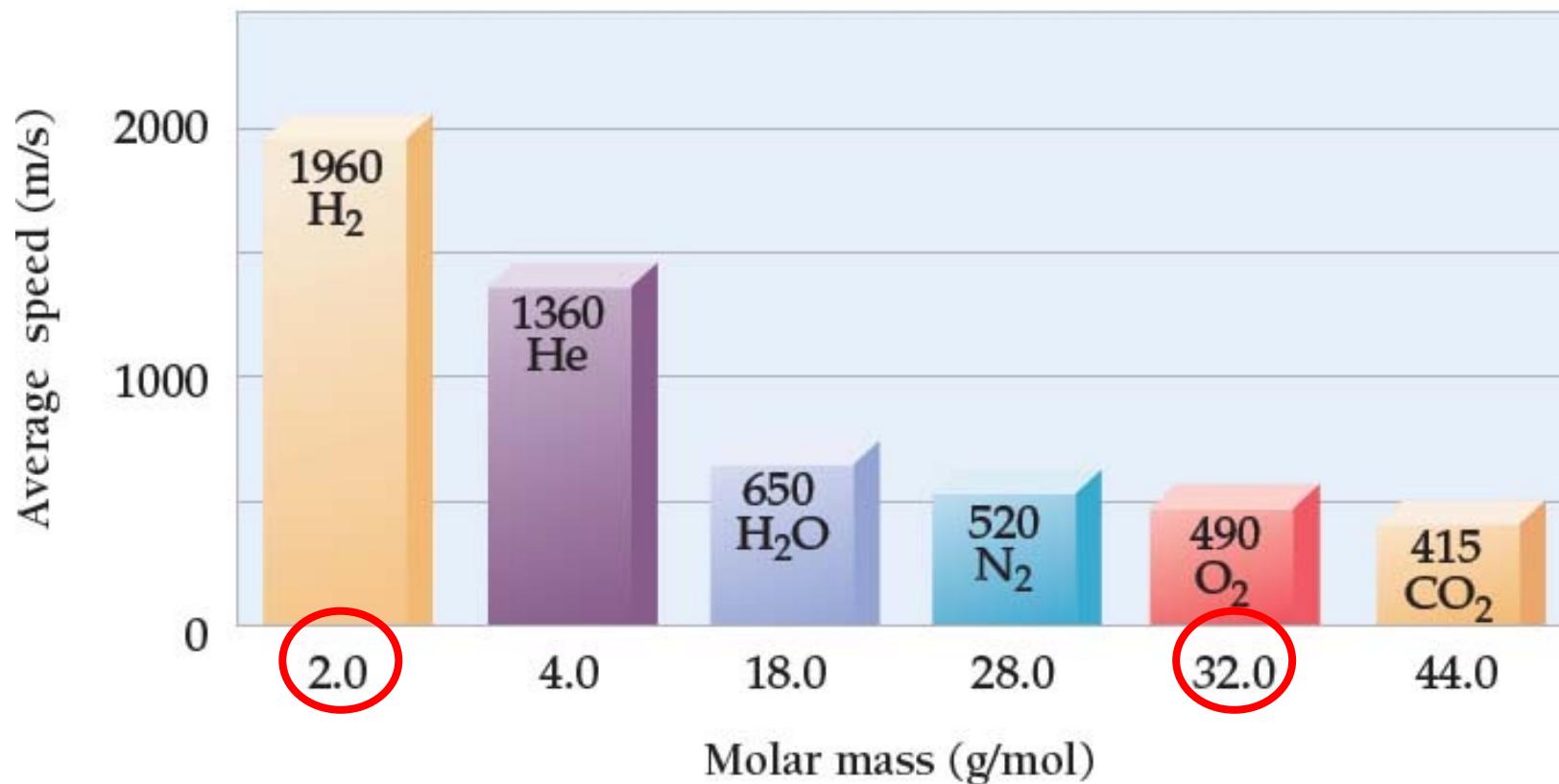
T = Hvor hurtigt bevæger gaspartiklerne sig?

P = Med hvilken kraft rammer de beholderens vægge?



Kinetisk molekylær teori for gasser

Gennemsnitlige hastigheder (m/s) for nogle gasmolekyler ved 25 °C

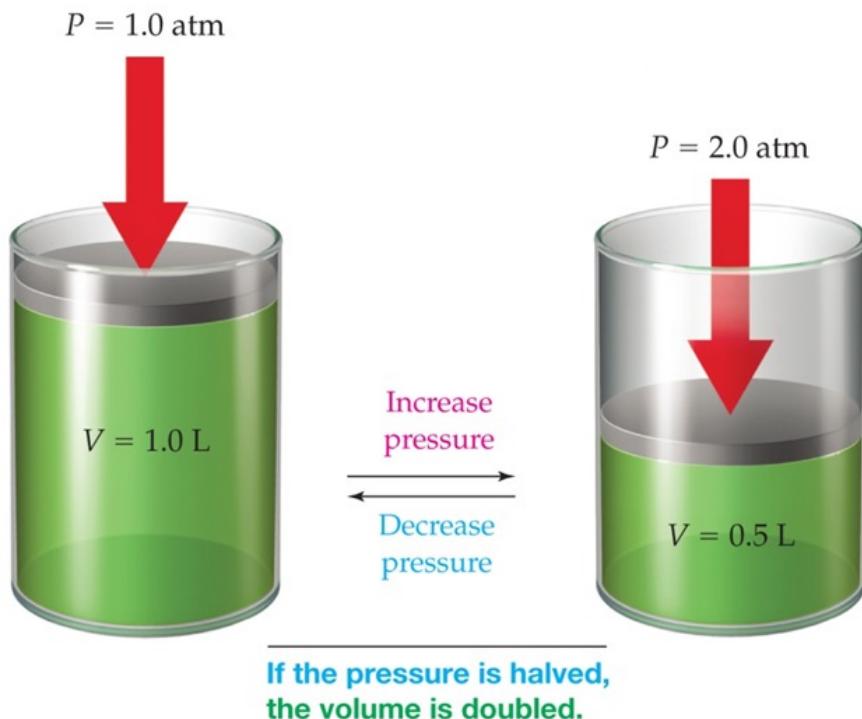


$$v_{\text{average}} = \sqrt{3 * R * T / (M_r)} \quad (16 \text{ gange lettere, } 4 \text{ gange hurtigere})$$

Idealgasligningen

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

tryk stofmængde
 \ |
 volumen absolutte temperatur
 gaskonstant



n, T konstant:
større tryk udløser
mindre volumen

$$P_1 V_1 = P_2 V_2$$

Idealgasligningen

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

tryk stofmængde
 \ |
 volumen absolutte temperatur
 |
 gaskonstant

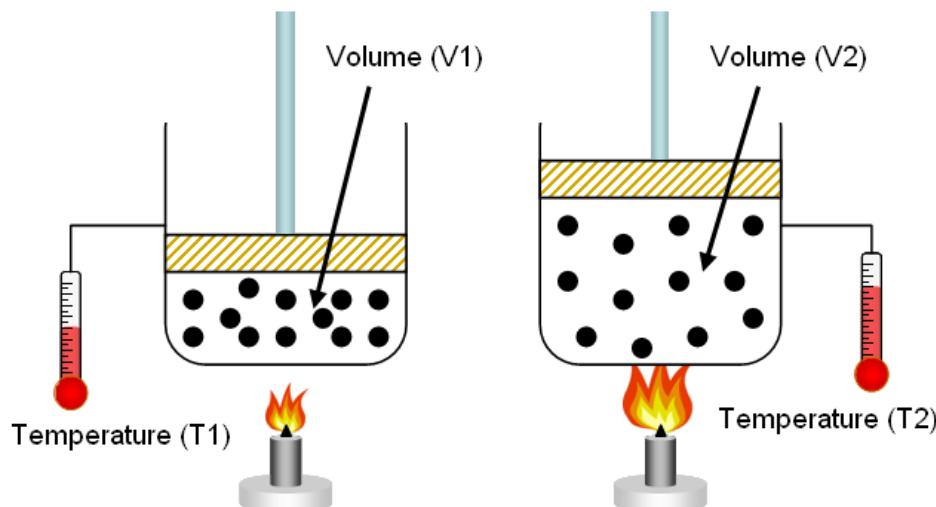


n, V konstant:
Større temperatur udløser
større tryk

Idealgasligningen

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

tryk stofmængde
 \ |
 volumen absolutte temperatur
 | gaskonstant



n, P konstant:
Større temperatur udløser
større volumen

En vejrballon fyldes med 1000 L helium gas ved 25 °C temperatur og 1 bar tryk. Hvilket volumen har ballonen når den er steget til 20 km højde, hvor temperaturen er -50 °C og trykket er 0,08 bar? Antag at helium forholder sig som ideal gas.

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

$$\frac{P_1 \cdot V_1}{n_1 \cdot T_1} = \frac{P_2 \cdot V_2}{n_2 \cdot T_2}$$

her er $n_1 = n_2$ og falder bort

$$\frac{P_1 \cdot V_1}{T_1} = \frac{P_2 \cdot V_2}{T_2}$$

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

$$R = 0,0831 \text{ L} \cdot \text{bar}/(\text{K} \cdot \text{mol})$$

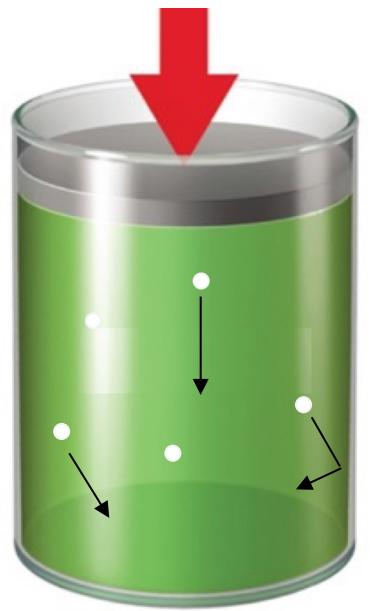
$$R = 0,0820 \text{ L} \cdot \text{atm}/(\text{K} \cdot \text{mol})$$

$$R = 8,314 \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{mol})$$

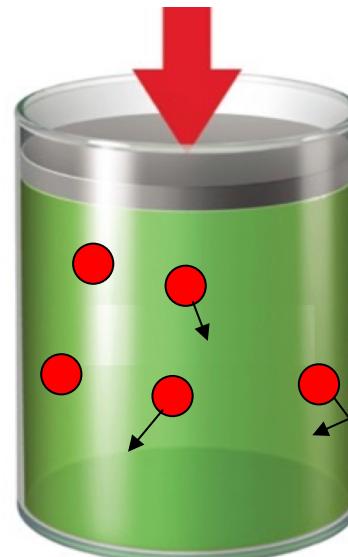
ved 25 °C ($T=298 \text{ K}$) og $P=1 \text{ bar}$ er $V/n=RT/P=24,8 \text{ L/mol}$

Hvilken slags gasmolekyle det er, indgår ikke-hvorfor?

Ved 25 °C laver 1 mol i 24,8 L et tryk P=1 bar



1 bar



Den gennemsnitlige bevægelsesenergi er ens for forskellige gasmolekyler (**tunge er langsommere**).

Samme antal gasmolekyler i samme volumen laver samme tryk.

Molær volumen afhænger kun af temperatur og tryk $V/n=R\cdot T/P$

Venus har 96,5% CO₂ atmosfære med
 $T=1050$ K og $P=75$ atm
 $R=0,0820$ L·atm/(K·mol)

$$V/n=1,14 \text{ L/mol}$$



Geraniol er et flygtigt (let fordampende) duftstof. Ved 1 bar og 260 °C fylder 0,48 g geraniol damp 0,1373 L.

- a) Hvilken stofmængde geraniol blev brugt?
- b) Hvad er gerianols molmasse?

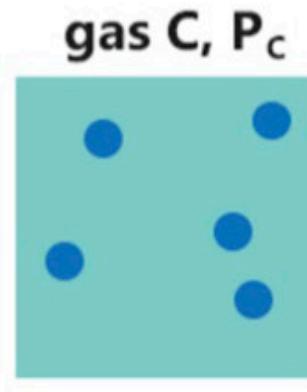
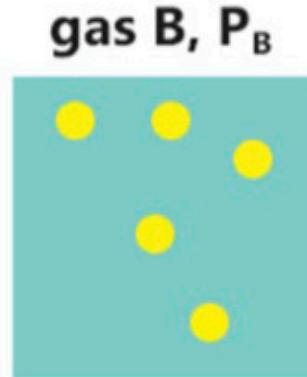
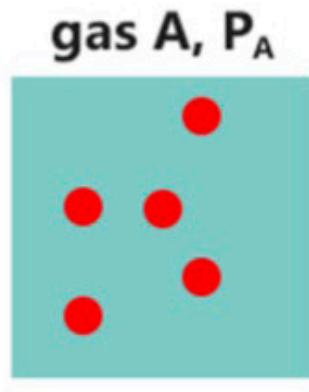
$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

a) $T = (260+273,15) \text{ K} = 533,15 \text{ K}$

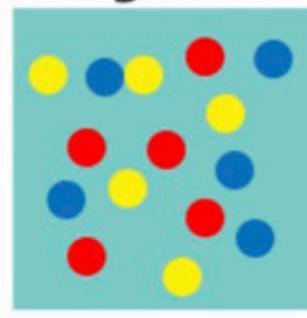
$$\begin{aligned}n &= PV/(RT) = (0,1373 * 1 \text{ bar} * L) / (0,08314 \text{ L} * \text{bar} * \text{mol}^{-1} * \text{K}^{-1} * 533,15 \text{ K}) \\&= 0,0031 \text{ mol}\end{aligned}$$

b) $M_r = m/n = 0,48 \text{ g} / (0,0031 \text{ mol}) = 154,9 \text{ g/mol}$

Gasblandinger: Tryk er summen af "partielle tryk":



gas A + gas B + gas C



$$P_{\text{total}} = P_A + P_B + P_C$$

$$\frac{P_A}{P_{\text{total}}} = \frac{n_A}{n_{\text{total}}}$$

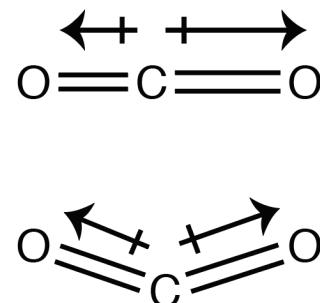
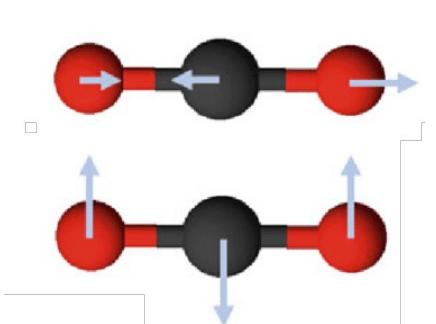
"molbrøk"

21% O₂ og 78% N₂ i luften (1 atm lufttryk):
 $P_{O_2} = 0,21 \text{ atm}$; $P_{N_2} = 0,78 \text{ atm}$;

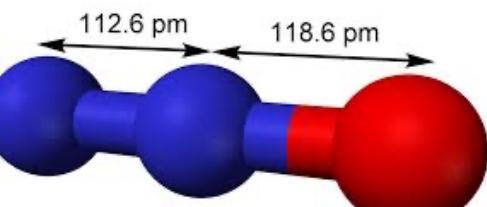
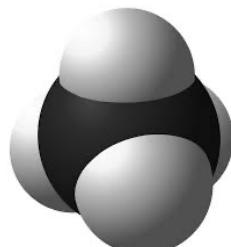
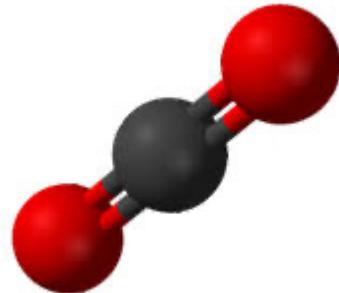
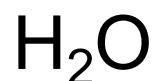
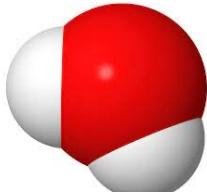
se f eks opgave 10.82

Drivhusgasser interagerer med IR stråling.

Dette er kun muligt for gasmolekyler der kan ændre deres polaritet i en vibration.

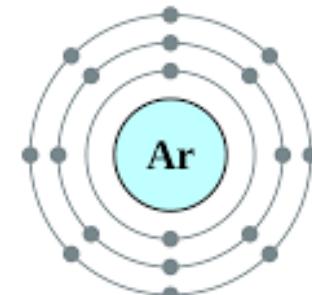
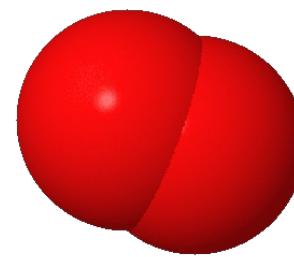


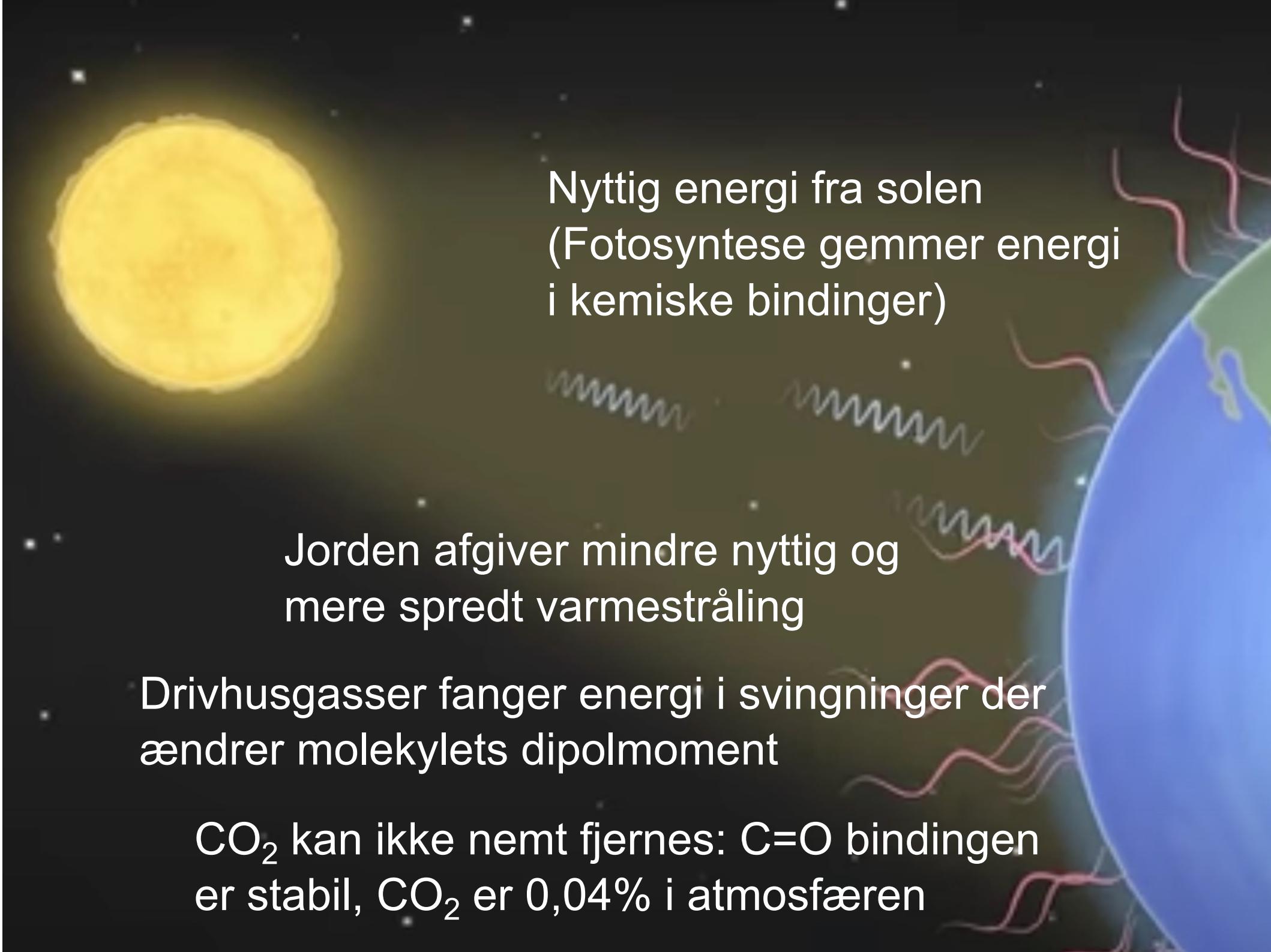
Drivhusgasser:



Varmeenergi indfanges i svingningerne.

Ikke-Drivhusgasser
(enkelt atom eller 2 ens atomer):





Nyttig energi fra solen
(Fotosyntese gemmer energi
i kemiske bindinger)

Jorden afgiver mindre nyttig og
mere spredt varmestråling

Drivhusgasser fanger energi i svingninger der
ændrer molekylets dipolmoment

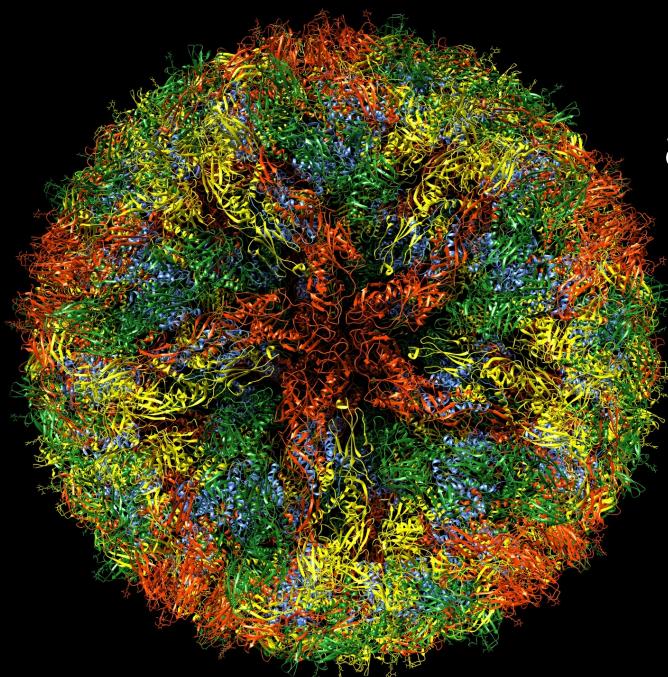
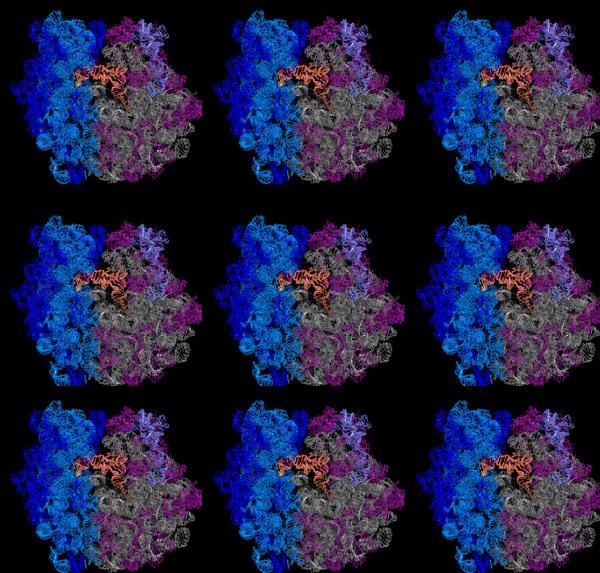
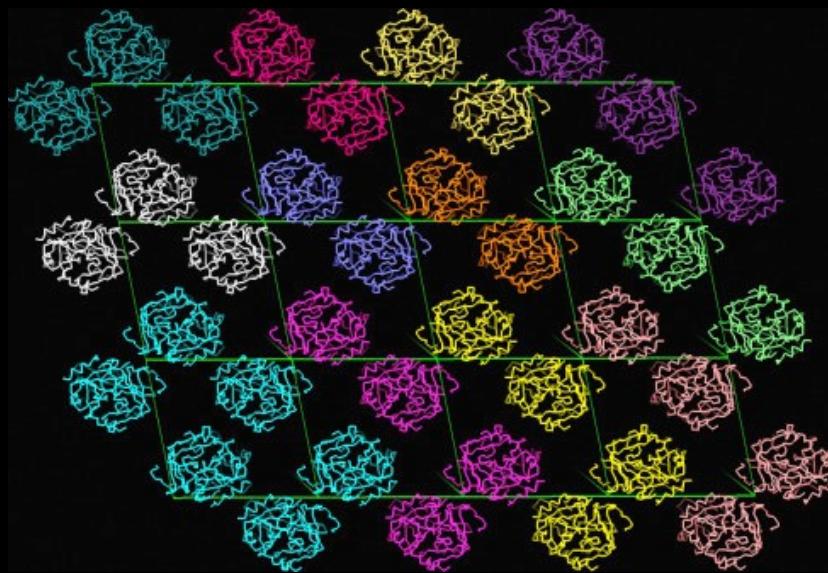
CO₂ kan ikke nemt fjernes: C=O bindingen
er stabil, CO₂ er 0,04% i atmosfæren

26050 Kemi for Life Science

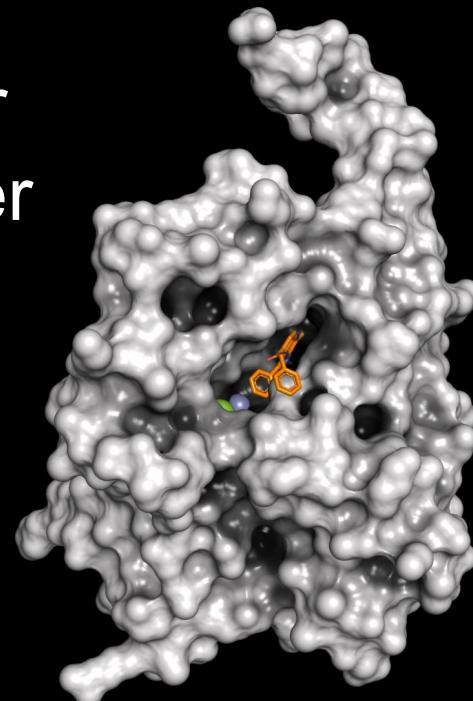
- 1 Kemisk regning, periodisk system, navngivning
- 2 Reaktioner
- 3 Elektroner, orbitaler og periodiske trends
- 4 Bindinger
- 5 Energi
- 6 Faste stoffer og oplosninger**
- 7 Reaktionskinetik
- 8 Ligevægt
- 9 Ligevægtsberegninger
- 10 Drivkraft af kemiske reaktioner
- 11 Kernekemi
- 12 Overgangsmetaller og komplekser
- 13 Organisk og biologisk kemi

Nye materialer- f eks SiO_2 aerogel som robust isolationsmateriale med $0,001 \text{ g/cm}^3$ densitet





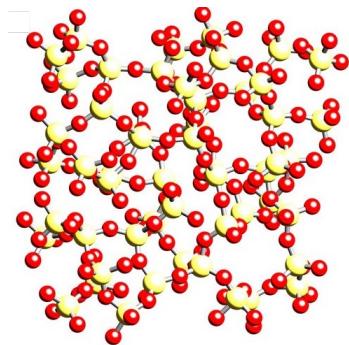
Krystalstruktur af biomolekyler



<https://www.rcsb.org>

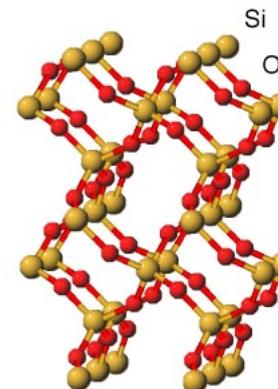
6.1 Faste stoffer

Amorfe



uordnet

Krystallinske



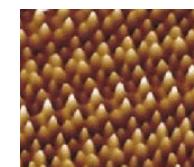
regelmæssigt ordnet



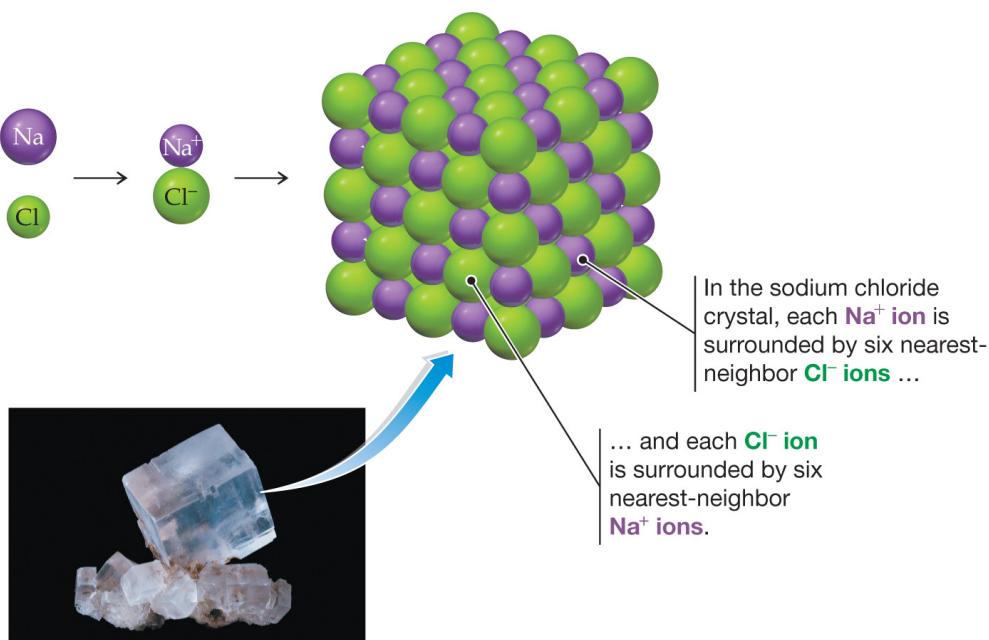
På atomart niveau er stoffets struktur

Hvilke kræfter holder krystallinske faststoffer sammen

Slags faststof	Kræfter	Egenskaber	Eksempler
Ionisk	Ion–ion kræfter	Skør, hård, højsmeltende	NaCl
Molekylær	Dispersionskræfter, dipole–dipole kræfter, hydrogen bindinger	Blød, lavt smeltende	H_2O
kovalent netværk	Kovalente bindinger	Hård, højsmeltende	C (diamant), SiO_2
Metaller	Metalliske bindinger	Variabel hårdhed og smeltepunkt, ledende	Fe



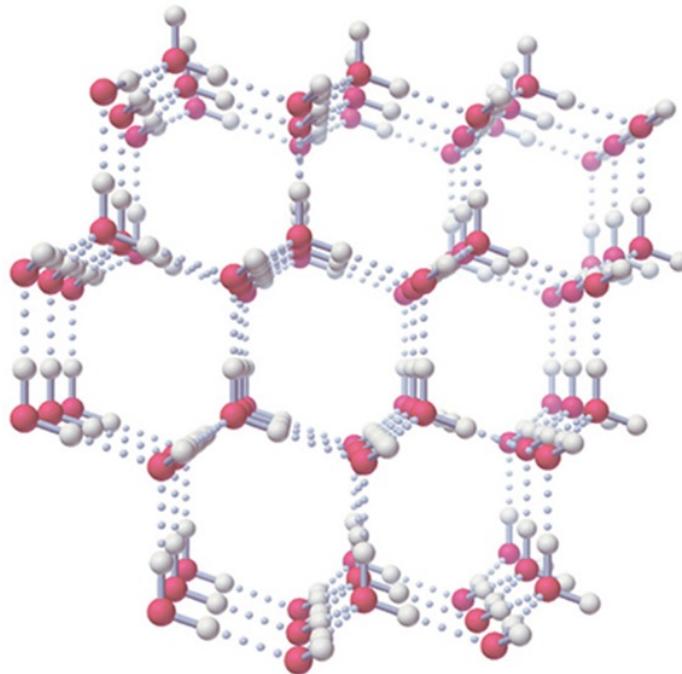
A. Ioniske faststoffer: Partiklerne er ioner som holdes sammen af ionbindinger.



Den indre energi der friges i dannelsen kaldes for gitterenergi og stiger med ladningen for kation og anion.

B. Molekylære faststoffer: Partikler er molekyler, der holdes sammen af intermolekylære kræfter. Et eksempel er is.

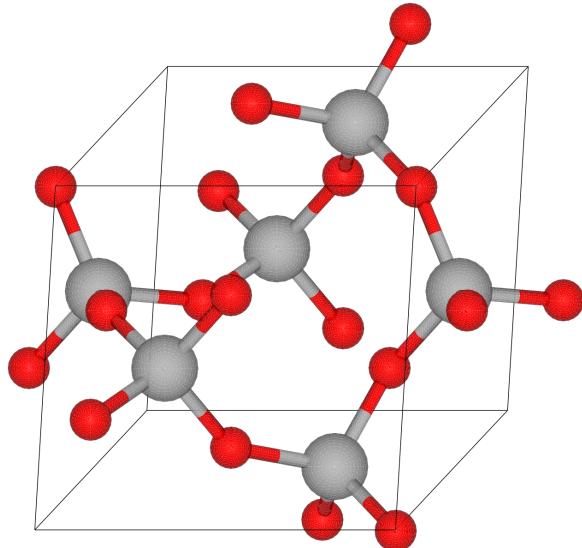
(a) Ice consists of individual H₂O molecules held together in a regular manner by hydrogen bonds.



C. Kovalent netværk: Partikler er atomer bundet sammen af kovalente bindinger til et kæmpe, tredimensionelt array.

Silica SiO_2

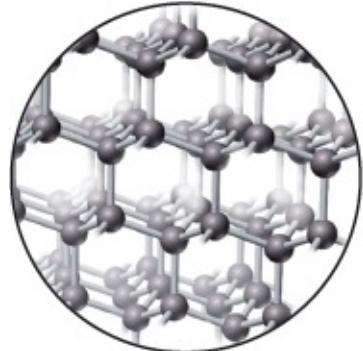
kvarts, sand



dårligere orbital-overlap gør at SiO_2 ikke favoriserer strukturen som CO_2 har

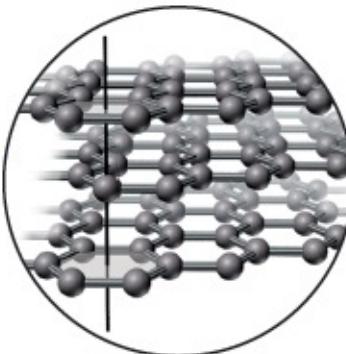
Kovalente netværks-faststoffer af kulstof

Diamant

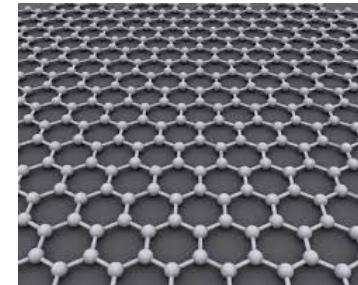


sp^3

Grafit

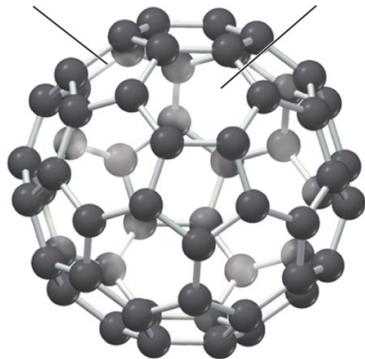


Grafen

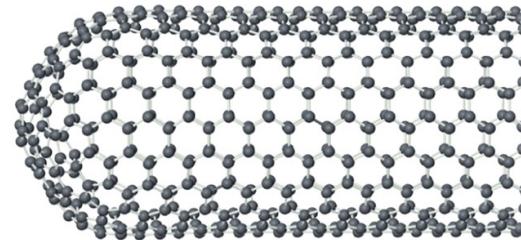


Fulleren

12 pentagonal faces 20 hexagonal faces

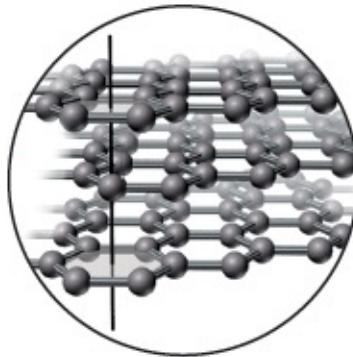


Nanotubes / Nanorør

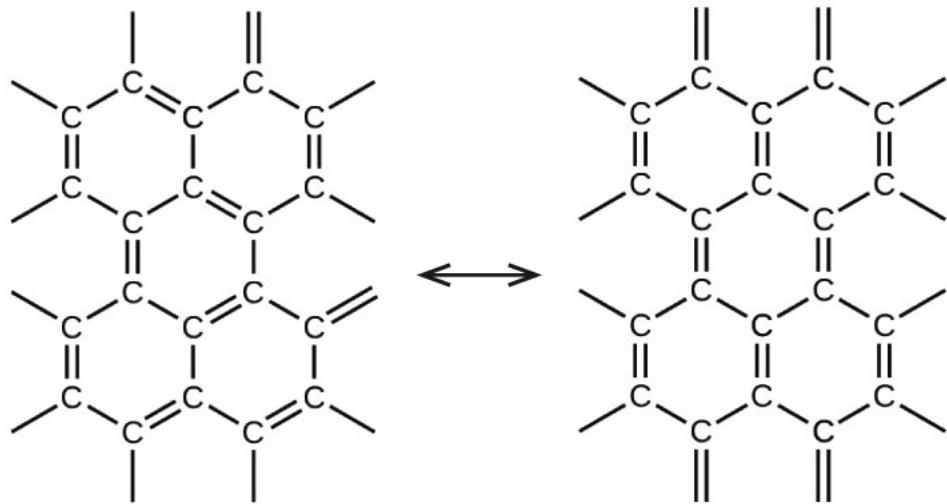
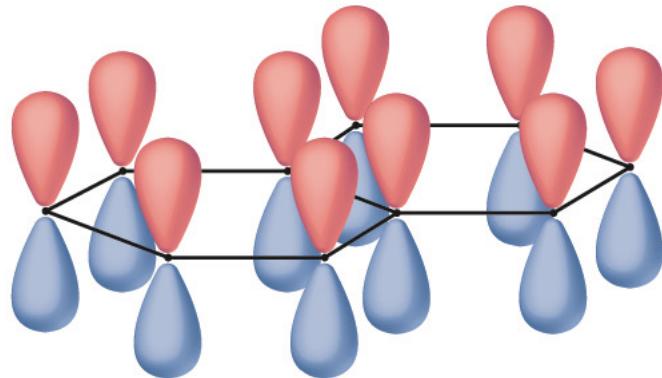


Forskellige strukturelle former for et element kaldes for **allotroper** (f eks også O_2 =dioxygen og O_3 =ozon)

I grafit (og grafen) er alle C sp^2 hybridiseret med et hav af π -elektroner. Grafit har ledningsevne (som ikke-metal).

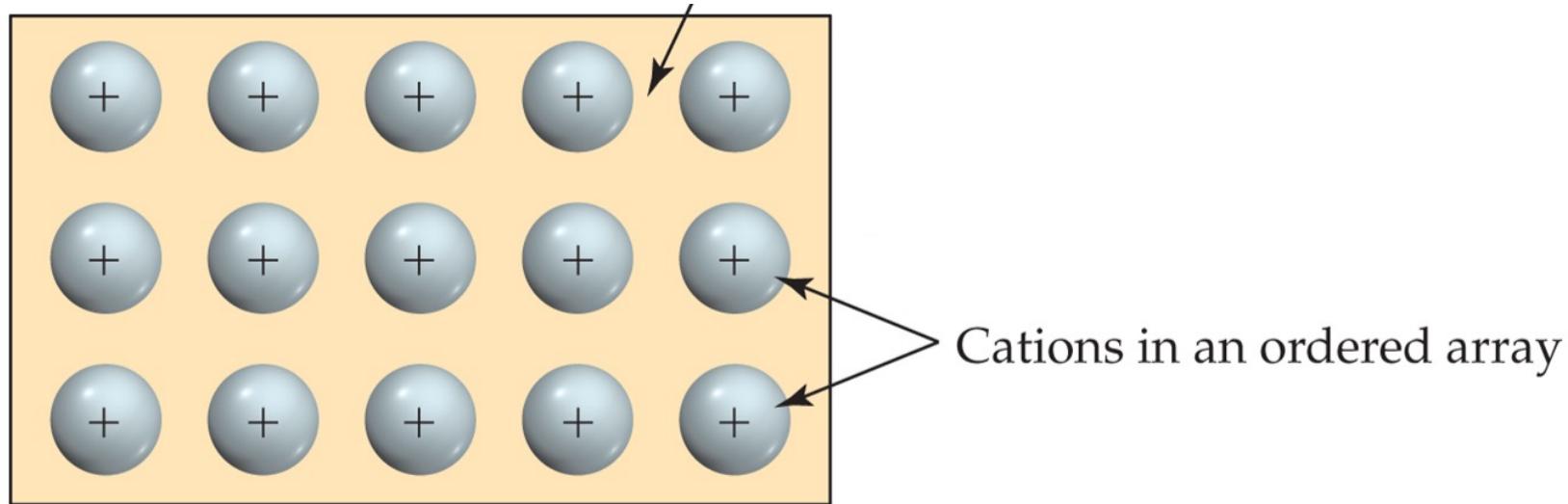


hav af π -elektroner der ikke sidder fast mellem kernerne men er bevægelige



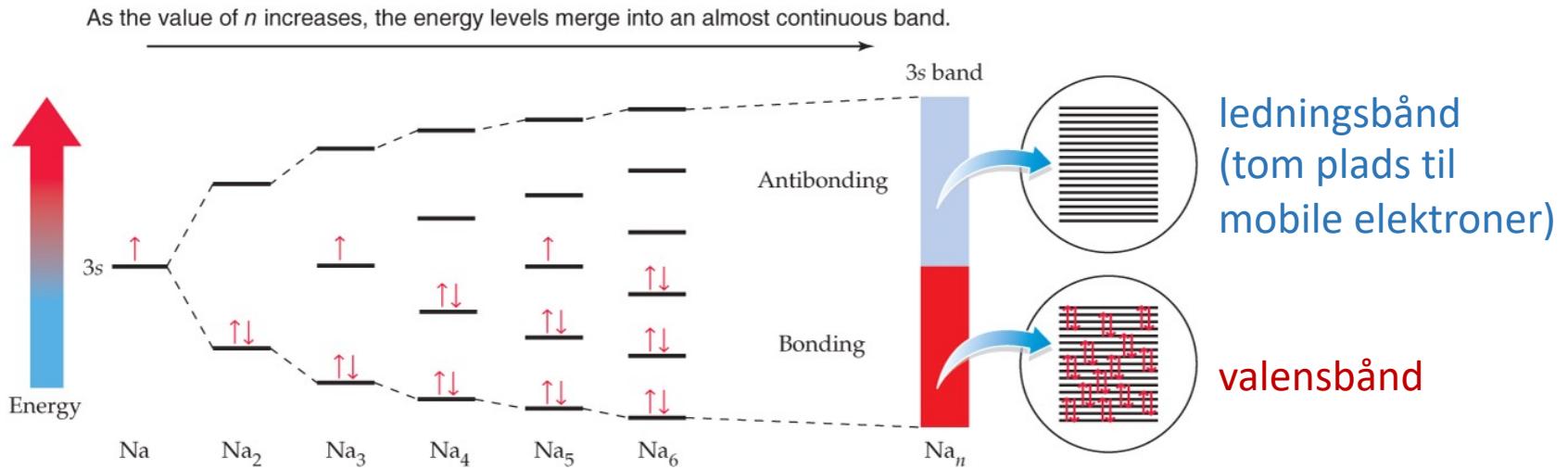
D. Metalliske faste stoffer med elektrisk (3D)-ledningsevne

i.) Elektron-hav-model: Metalkationer i et hav af delokaliserede elektroner, der er frie til at bevæge sig gennem krystallen.



ofte høje smelte- og kogepunkter; elektroner der ikke er bundet til et bestemt atom gør at metal er formbar og ledningsevne

ii.) Molekylorbitalteori for metaller



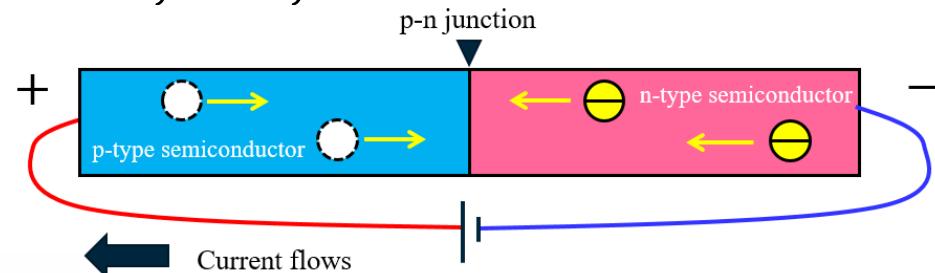
Metaller har et kontinuerligt sæt af energiniveauer (energibånd).

Båndet indeholder så mange energiniveauer som molekulære orbitaler.

Faststoffer kan modificeres ved at indbygge andre atomer (“doping”):

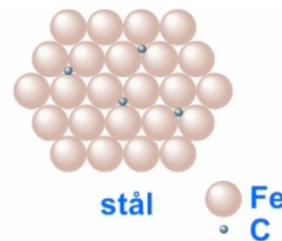
Halvledere (f eks Si) i moderne elektronik, LED, solceller:

B (3 valenselektroner) eller
P (5 valenselektroner) giver dem ladning



Legeringer:

Stål, Bronze



Farven i sten:

AMETHYST SiO_2	DIAMOND C	RUBY Al_2O_3	SAPPHIRE Al_2O_3

plus Fe^{3+}

N

Cr-ioner

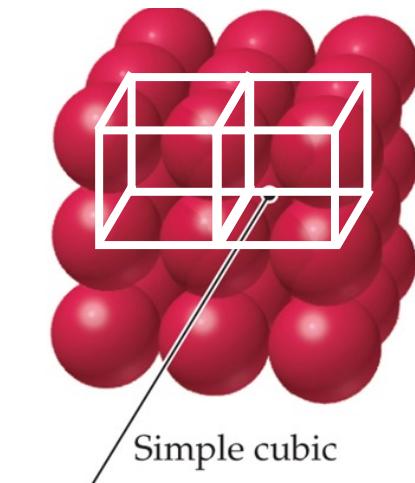
Ti/Fe ioner

Hvilket er et eksempel på et ”molekylært krystallinsk faststof”?

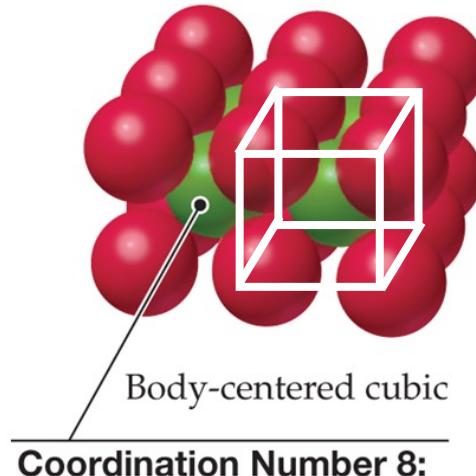
Choose one answer

- MgCl₂
- gummi
- diamant
- grafit
- is 
- NaCl

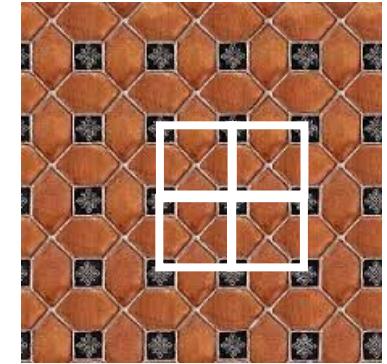
Krystaller er opbygget af enhedsceller der gentages med et regelmæssigt "mønster" i alle tre dimensioner



Coordination Number 6:

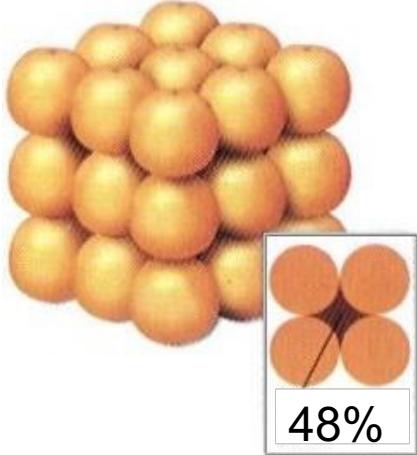


Coordination Number 8:

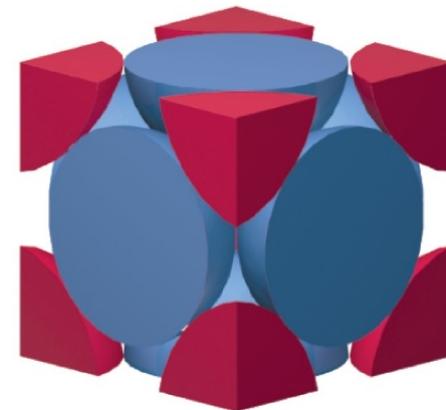
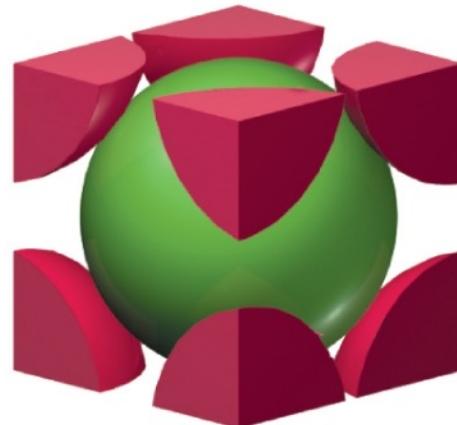
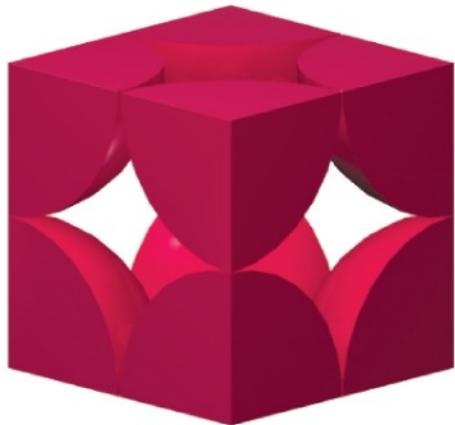
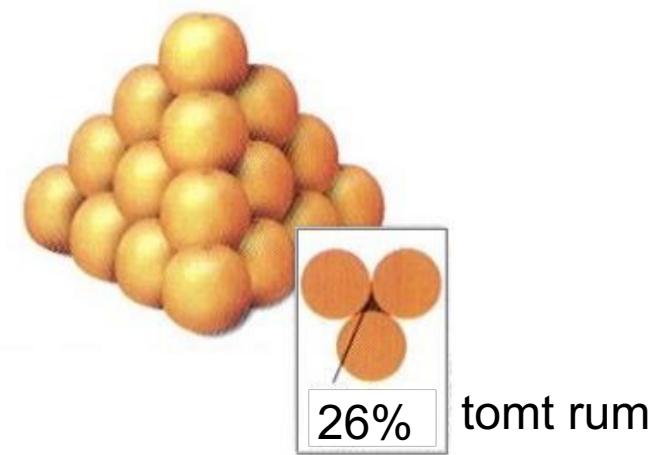


Hvor mange atomer rører hvert atom

Pakning af kugler udnytter rummet forskelligt

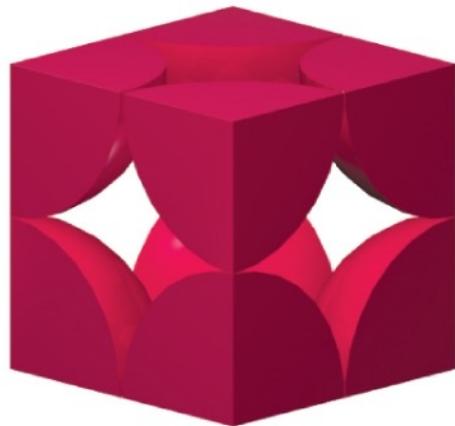


32%



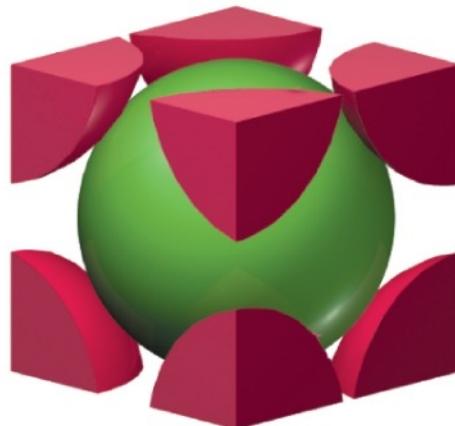
Atomer på hvert hjørne indgår med $\frac{1}{8}$ del,
atomer på kanterne med $\frac{1}{4}$ del,
atomer på grænseflade som $\frac{1}{2}$,
atomer inde i enhedscellen indgår helt i enhedscellen

8 hjørner med $\frac{1}{8}$ atom



Primitivt

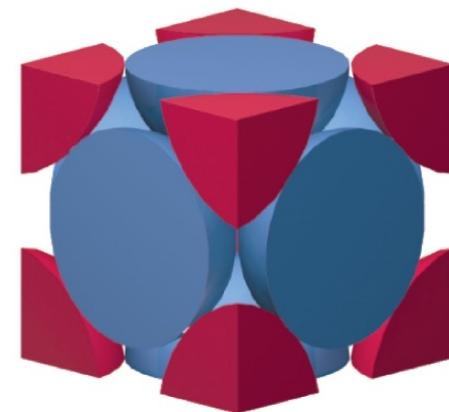
8 hjørner med $\frac{1}{8}$ atom
plus 1 atom inden i



Rumcentreret

body-centered cubic (BCC)

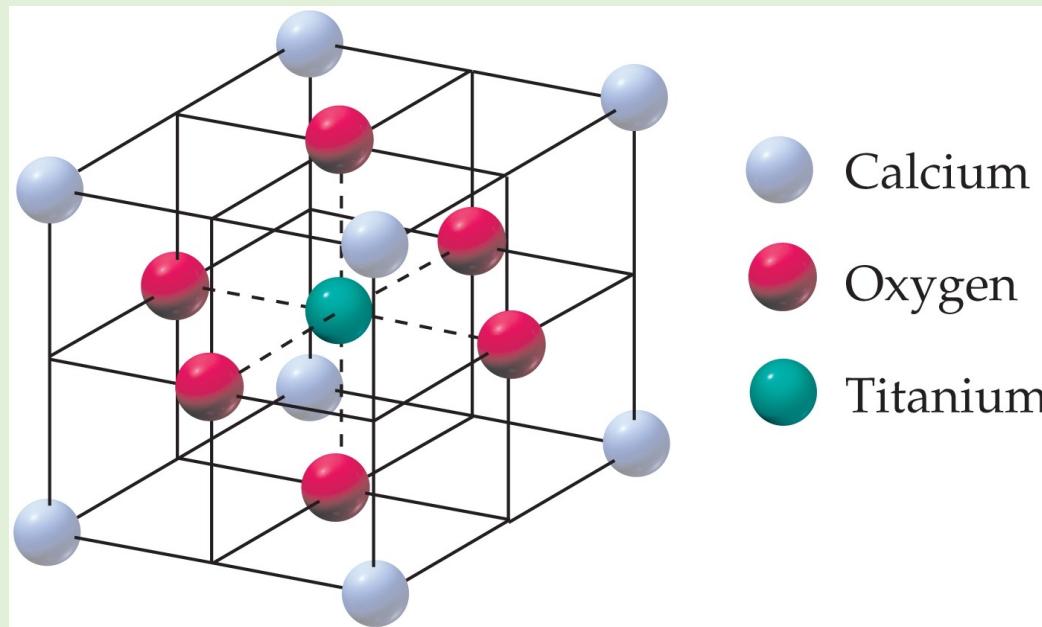
8 hjørner med $\frac{1}{8}$ atom plus
6 grænseflader med $\frac{1}{2}$ atom



Fladecentreret

face-centered cubic (FCC)

Opg 12.6 Perovskit anses for et vidundermateriale til solceller.
Det danner følgende ioniske krystal.
Hvad er formlen og hvilket oxidationstal har Titan?

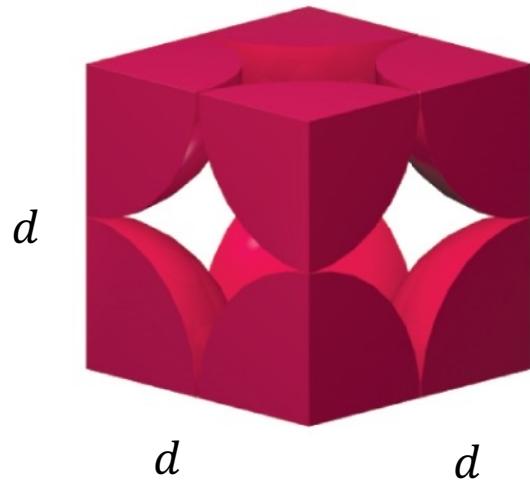


med Ca^{2+} og O^{2-} mangler Ti^{4+}
med oxidationstal +4

OBS: Der er altid et heltal af hvert atom per enhedscelle.
Sumformel er det mindste heltalsforhold for en ionforbindelse

Fra enhedscelle til egenskaber

$$\text{Densitet} = \frac{\text{masse i enhedscelle}}{d^3} \quad \text{g/cm}^3 \text{ (svarer til kg/l)}$$



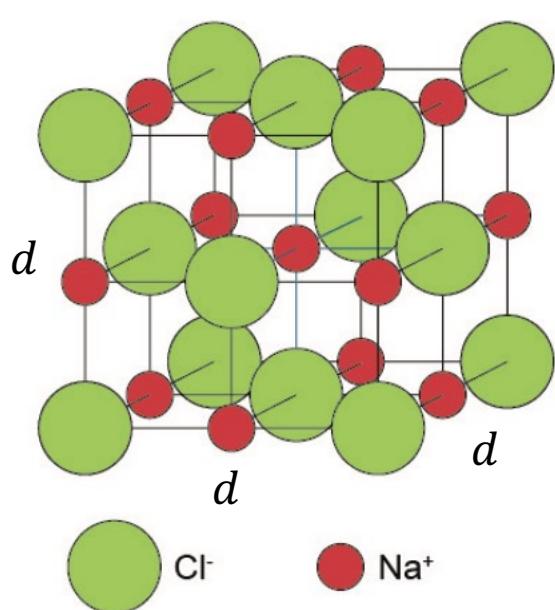
masse i gram i enhedscelle:

1. Antal atomer i enhedscellen
2. gang med deres molmasse
3. divider med $6,022 \times 10^{23}/\text{mol}$
(Avogadros tal)

Natrimchlorid laver den viste kubiske enhedscelle. Hvad vejer enhedscellen?

Sodium 11	Chlorine 17
Na 22,990	Cl 35,45

masse i gram i enhedscelle:

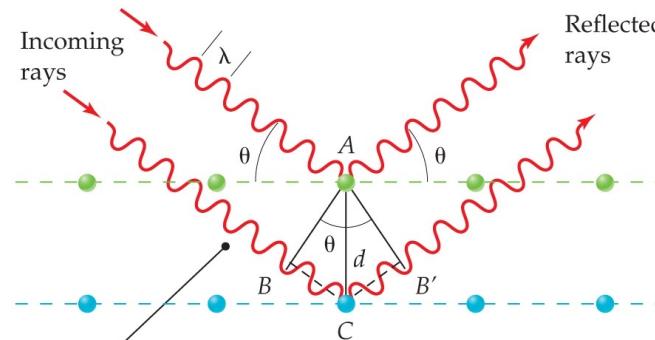
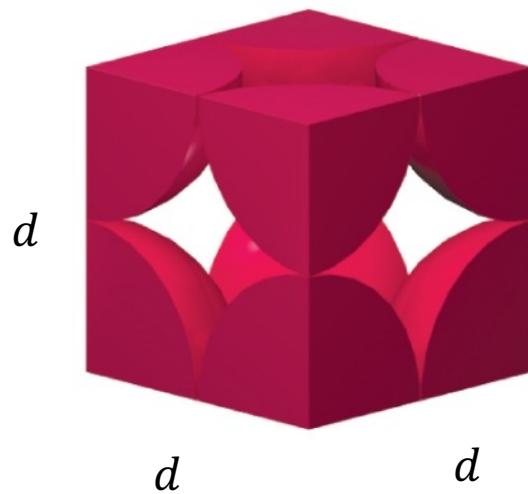


1. 4 Cl og 4 Na per celle
(sumformel NaCl, mindste heltalsforhold)
2. 4 Na (22,99 g/mol) og 4 Cl (35,45 g/mol)
svarer til 233,76 g/mol
3. $233,76 \text{ g/mol} / (6,022 \times 10^{23} / \text{mol}) = 3,88 \times 10^{-22} \text{ g}$

Fra enhedscelle til egenskaber

$$\text{Densitet} = \frac{\text{masse i enhedscelle}}{d^3}$$

d vil ofte være oplyst, den er målbar med Røntgendiffraktion



$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

Bragg's Law

λ er bølgelængde af Røntgenstråling

$n=1,2,3, \dots$ er et heltal

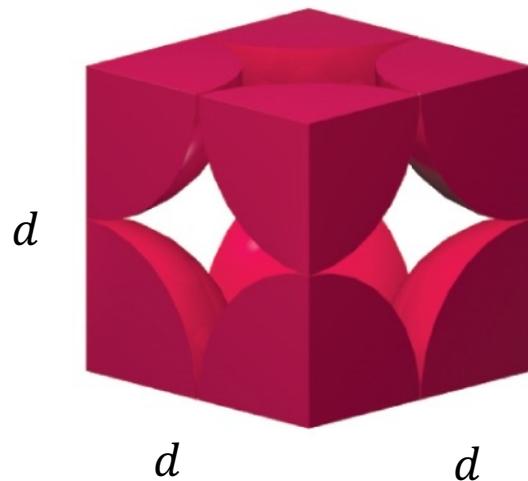
θ er vinklen hvor der optræder signal

12.32: beregn d fra λ og θ ; brug $n=1$

Fra enhedscelle til egenskaber

$$\text{Densitet} = \frac{\text{masse i enhedscelle}}{d^3} \quad \text{g/cm}^3 \text{ (svarer til kg/l)}$$

d vil være i størrelsesorden 100 pm og skal omregnes til cm



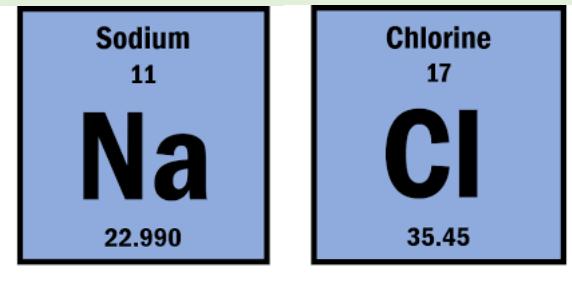
$$100 \text{ pm} = 10^{-10} \text{ m} = \mathbf{10^{-8} \text{ cm}}$$

$$300 \text{ pm} = 3 \times 100 \text{ pm} = \mathbf{3 \times 10^{-8} \text{ cm}}$$

$$564 \text{ pm} = 5,64 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

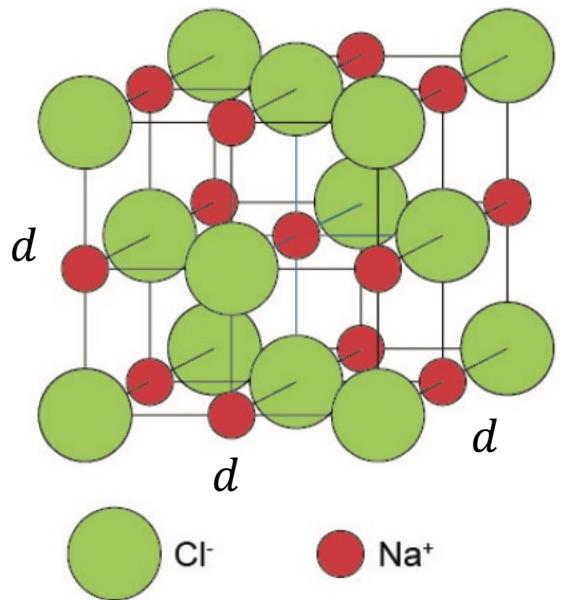
Natrimchlorid laver den viste kubiske enhedscelle med $d=564$ pm. Hvad er densiteten?

$$\text{Densitet} = \frac{\text{masse i enhedscelle}}{d^3} \quad \text{g/cm}^3 \text{ (svarer til kg/l)}$$



$$\text{masse} = 3,88 \times 10^{-22} \text{ g}$$

$$d=564 \text{ pm} = 5,64 \times 10^{-8} \text{ cm}$$



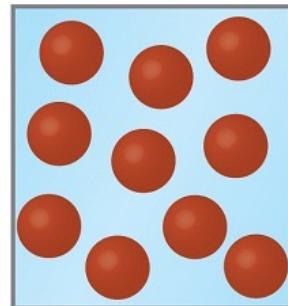
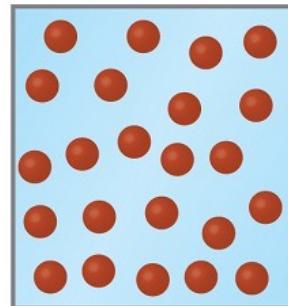
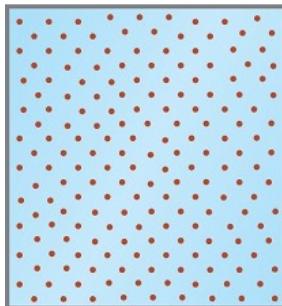
$$\text{Densitet} = \frac{3,88 \times 10^{-22} \text{ g}}{(5,64 \times 10^{-8} \text{ cm})^3} = 2,16 \text{ g/cm}^3$$

Kemiske egenskaber

Massefylde 2,165 g/cm³

6.2 Opløsninger og faktorer der påvirker opløselighed

- a) Vi taler om en **opløsning** hvis størrelsen af partiklerne i opløsning er 0,1-2 nm.
- b) Ved partikelstørrelse 2-1000 nm taler vi om en **kolloid**.
Aerosoler er luftbårne partikler mindre end 1000 nm.
- c) Hvis partiklerne er større og sætter sig, taler vi om en **suspension**.



(a)

(b)

(c)

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

stof der går i oplosning	$\Delta H^\circ_{\text{soln}}$ (kJ / mol)	$\Delta S^\circ_{\text{soln}}$ [J / (K · mol)]
NaCl (s)	3.9	43.4
O ₂ (g)	-12.1	-94.1

varme optages **varme afgives**
 $\Delta H > 0$ $\Delta H < 0$

Opløsning af faststof

ved høj nok
temperatur

**Uorden
tager til**
 $\Delta S > 0$

**Uorden
tager af**
 $\Delta S < 0$

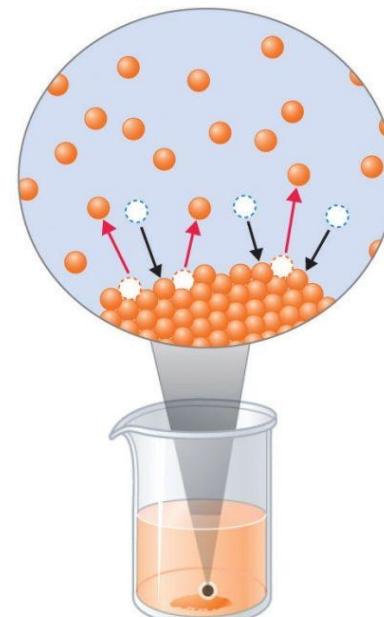
Opløsning af
ved lav nok
temperatur

Den makiskmale koncentration opløst stof kaldes for **opløselighed**

Umættet opløsning



koncentration opløst stof er mindre end dets opløselighed



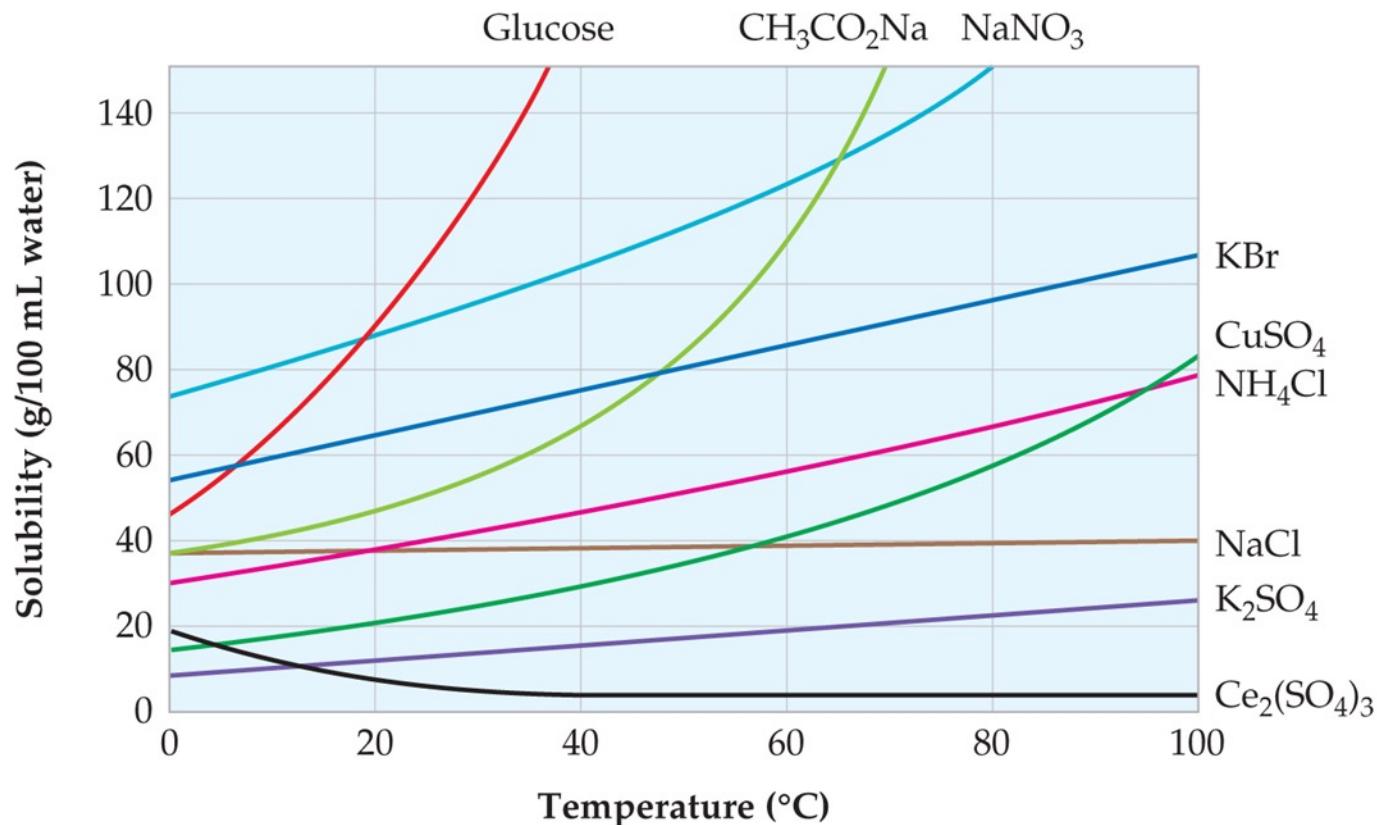
Mættet opløsning



koncentration opløst stof er lige dets opløselighed

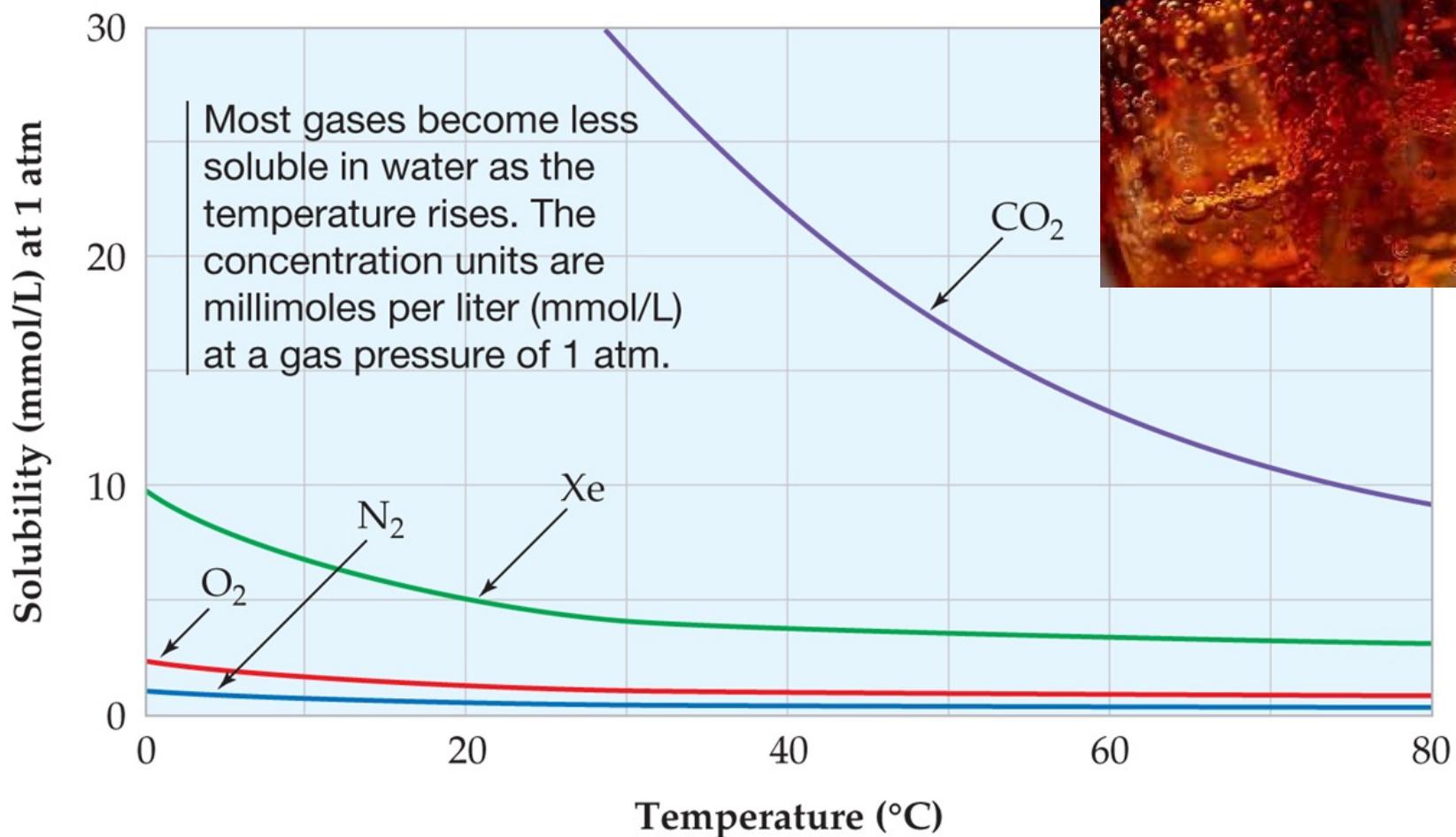
Opløselighed

stiger med temperatur for de fleste faststoffer: stigende uorden (entropi) er mere favorabel ved højere temperatur



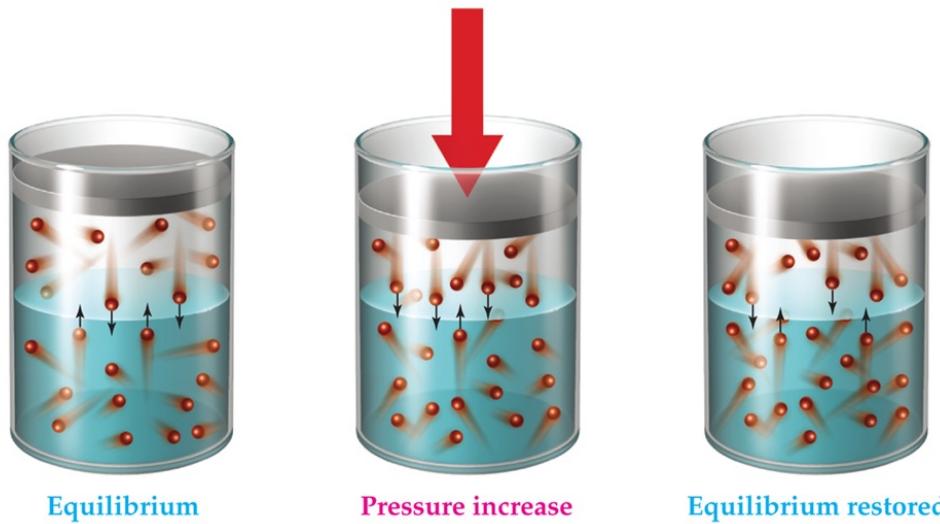
Opløselighed

falder med temperaturen for gasser: deres bevægelighed (entropi) falder når de går i opløsning. Det er mere favorabelt at de er i gasfase ved højere temperatur



Henry's lov beskriver partialtryk og opløselighed af gas i vand (mere er opløst ved større partialtryk)

$$\text{Opløselighed} = kP$$



partialtryk P (f eks stigende CO_2 i atmosfæren)

k er forskellig for forskellige gasser (stor for CO_2)!

19. Vægtning 2%:

Hvilket udsagn angående opløsninger eller opløselighed er forkert?

Choose one answer

- Opløsning af en gas i vand udløser oftest et fald i entropi for gasmolekylerne.
- Opløseligheden af polære molekyler er oftest størst i polære solventer.
- Opløsning af NaCl i vand udløser en entropistigning for Na^+ og Cl^- ionerne.
- Opløseligheden af en gas falder med stigende temperatur.
- Opløseligheden af glukose i vand stiger med stigende temperatur.
- Opløseligheden af en gas falder med stigende partialtryk for gassen.

Lav temperatur og højt partialtryk øger opløselighed for gasser

6.3 Kolligative egenskaber:

Egenskaber, der afhænger af forholdet mellem antallet af opløste partikler og antallet af oplosningsmiddelpartikler, men ikke af de opløste partiklers kemiske identitet.

- A. Forøgelse af kogepunkt
- B. Frysepunktssænkning
- C. Osmotisk tryk

Andel opløste partikler beskrives med forskellige koncentrationsmål

Stofmængdekoncentration eller molaritet $c = (\text{mol opløst stof})/\text{liter opløsning}^*$

Molalitet = $(\text{mol opløst stof})/\text{kg opløsningsmiddel}$

Molbrøk(A) = $(\text{antal mol A})/\text{totalt antal mol}$

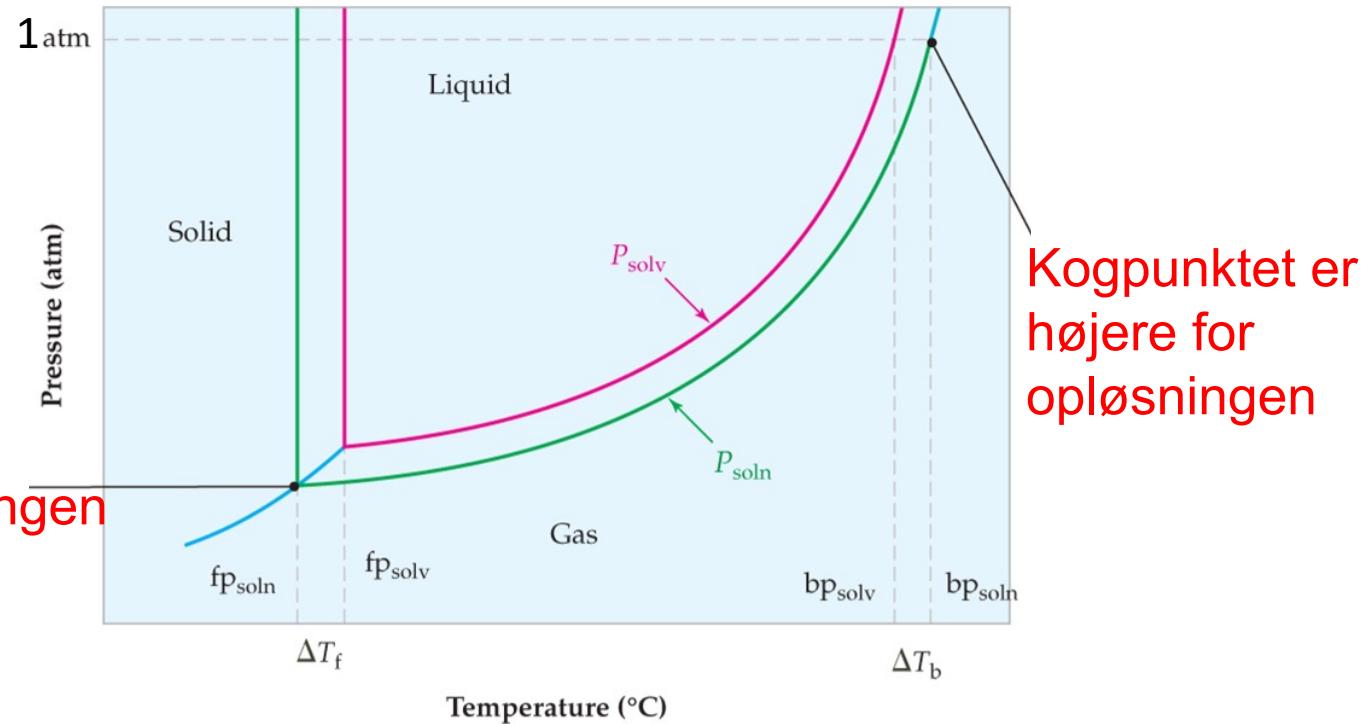
Massé%(A)	*100 %
ppm (A)	= (masse af A)/totalmasse *10^6 ppm
ppb (A)	*10^9 ppb

Beregn Massé% for 100 g glukose i 1000 g vand (ikke 10%).

*molaritet er temperaturafhængig idet volumen er temperaturafhængig

Kogepunktet stiger og frysepunktet falder i opløsninger i forhold til solventet

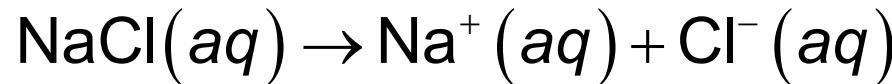
Smeltepunktet er lavere for opløsningen



En opløsning er en blanding: den har mere uorden end ren væske, og er derfor mere stabil (entropi)

Opløsninger har andre egenskaber end det rene solvent som afhænger af mængden af opløste partikler

$$\textit{Van't Hoff Faktor: } i = \frac{\text{Mol partikler i opløsning}}{\text{Mol opløst stof}}$$



For NaCl er den forudsagte værdi af $i = 2$.

Når opløste partikler hverken dissocieres eller associeres i opløsning, er $i = 1$ (f eks glukose i vand).

Kogepunktsforhøjelse ΔT_b og frysepunktssænkning ΔT_f af opløsninger er afhængig af "molaliteten"

molalitet $m = (\text{mol opløst stof})/\text{kg opløsningsmiddel}^*$

$$\Delta T_b = K_b \times m \times i$$

forhøjelse

$$\Delta T_f = -K_f \times m \times i$$

sænkning

Opløsningsmiddel	$K_b [(\text{°C} \cdot \text{kg}) / \text{mol}]$	$K_f [(\text{°C} \cdot \text{kg}) / \text{mol}]$
Benzen (C_6H_6)	2,64	5,07
Kloroform ($CHCl_3$)	3,63	4,70
Ethanol (C_2H_6O)	1,22	1,99
Vand (H_2O)	0,51	1,86

* ikke temperatur-afhængig, modsat molariteten

Hvilken af disse oplosninger sænker vandets frysepunkt mest, og hvorfor?

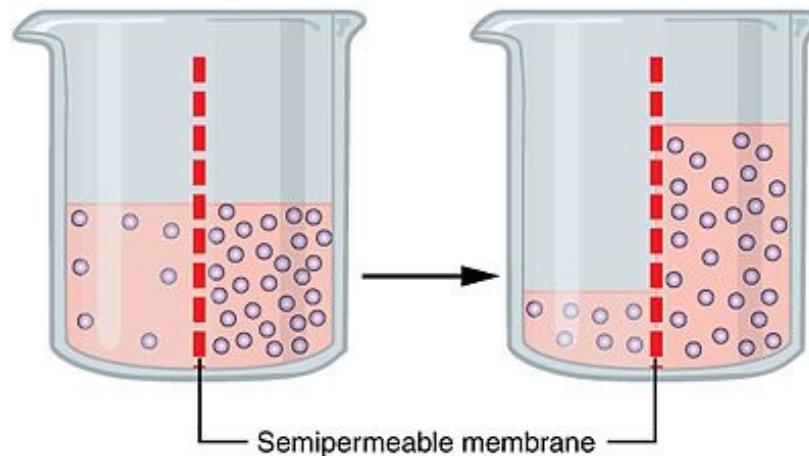
- 1 molal NaCl
- 1 molal glukose
- 1 molal CaCl₂
- 0,5 molal AlCl₃



Transport af molekyler: Osmose

Diffusion er den passive, spontane bevægelse af partikler til et område med lavere koncentration

Osmose: Diffusion af vand gennem en semipermeabel membran (kun vand kan gå igennem) til siden med højere koncentration opløst stof

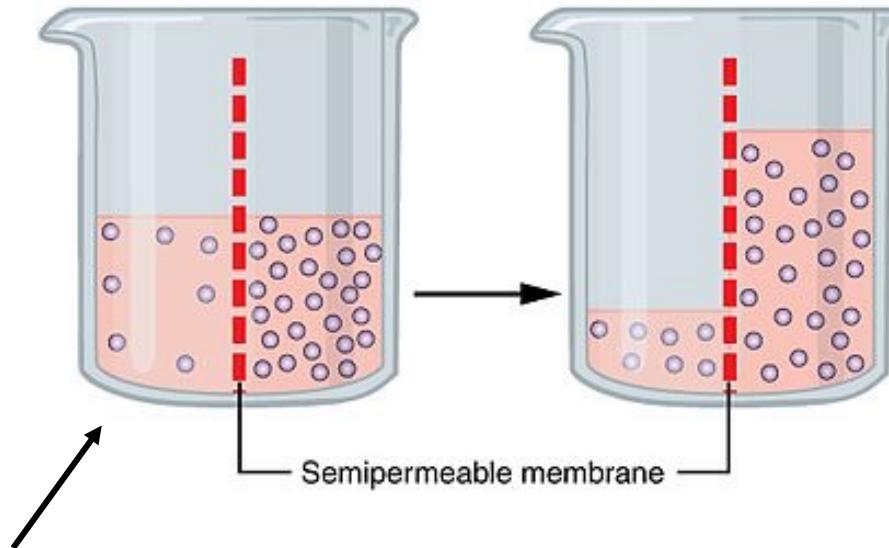


Ligningen for osmotisk tryk

=Trykket, der er nødvendigt for at få osmose til at stoppe

$$\Pi = cRTi$$

Koncentration gaskonstant absolut temperatur Van't Hoff faktor



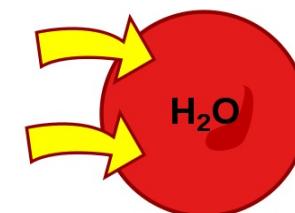
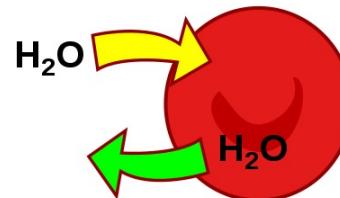
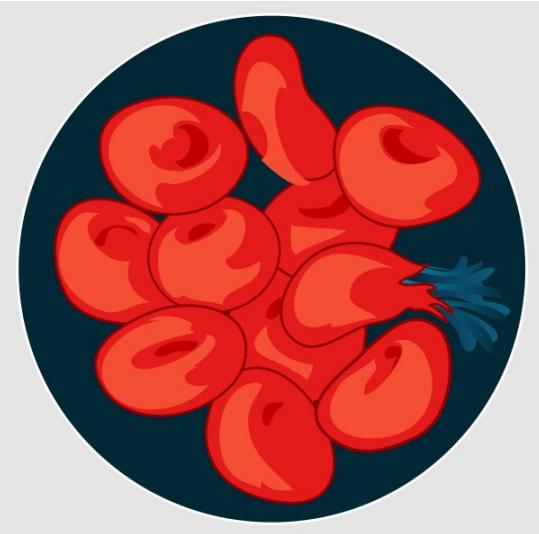
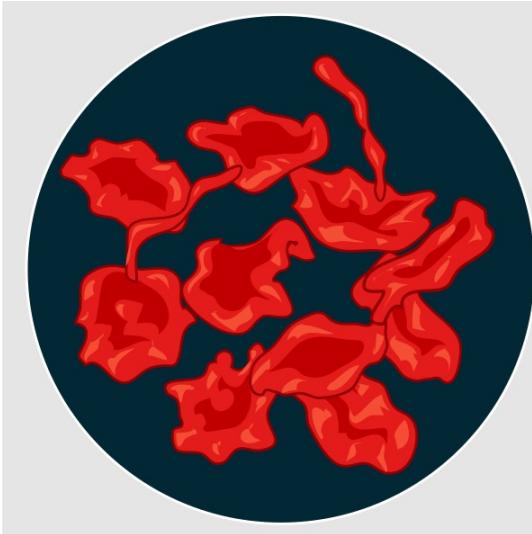
Flyder vand hen mod større eller mindre osmotisk tryk?

Cellemembraner er semipermeable membraner

Hypertonisk

Isotonisk
saltvandsopløsning

Hypotonisk



større ekstracellulære
koncentrationer af opløst stof

lavere ekstracellulære
koncentrationer af opløst stof

$$\Pi = cRTi$$

Isotonisk saltvandsopløsning har 0,158 M NaCl. Hvad er det osmotiske tryk i atm for denne opløsning ved 25 °C?

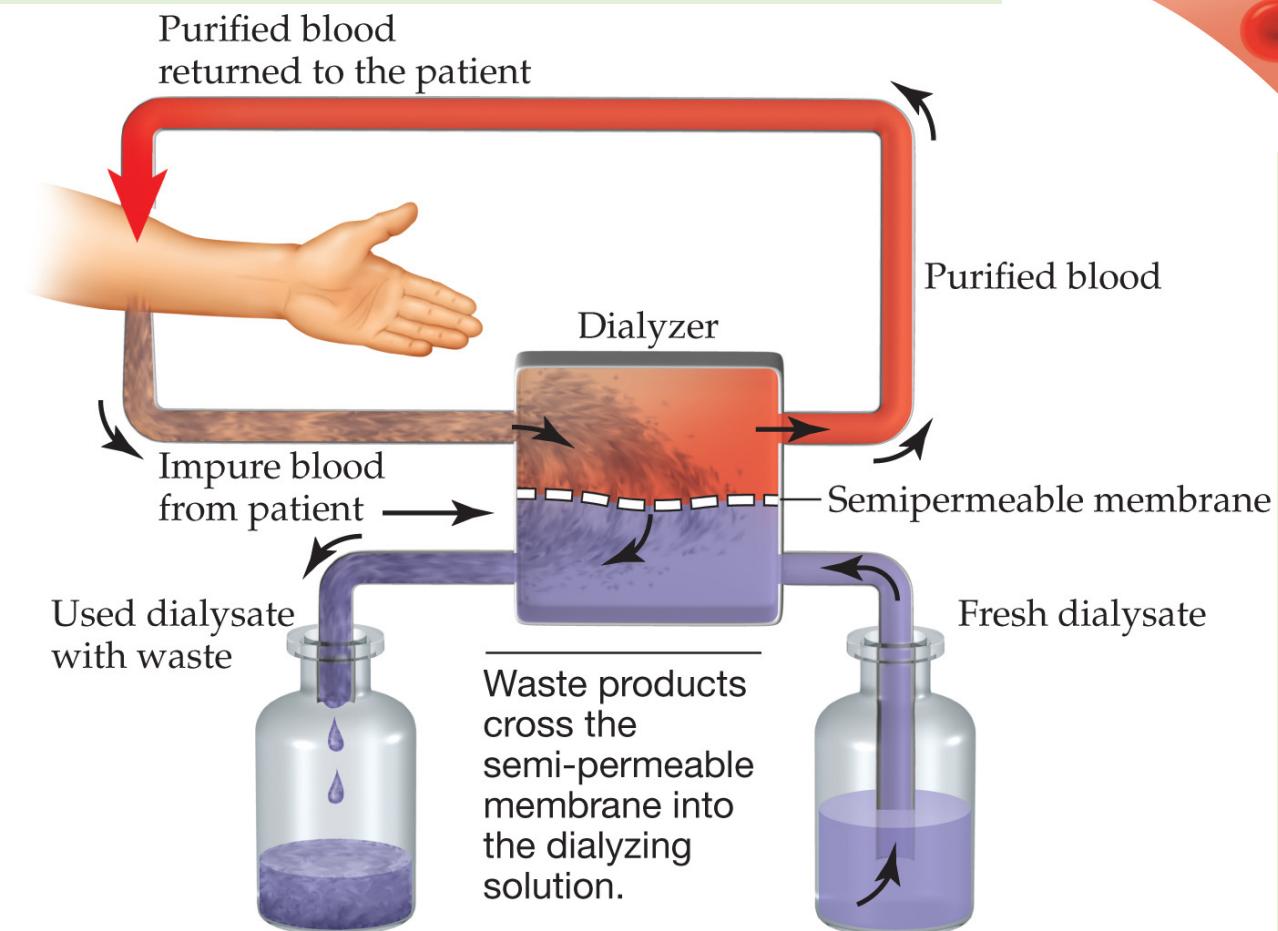
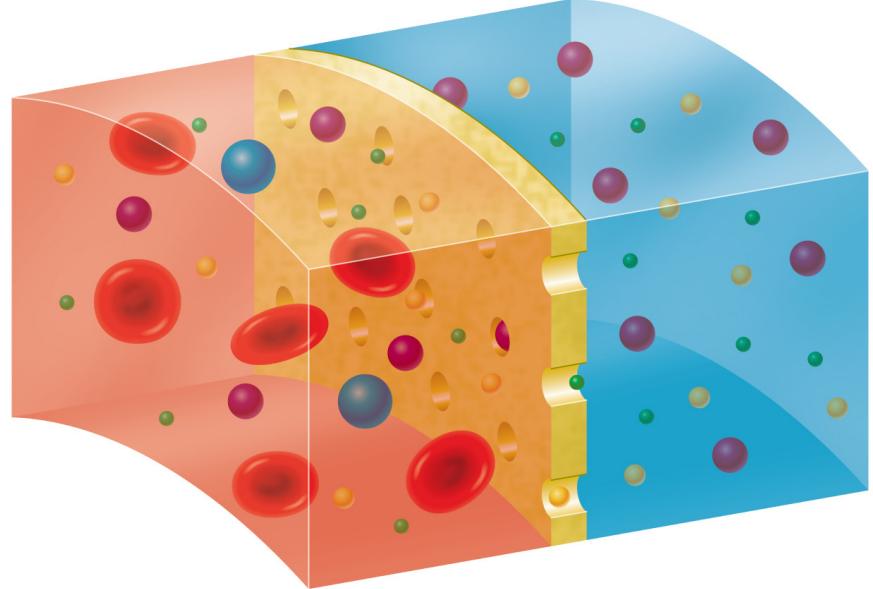
$$\Pi = cRTi$$

c= 0,158 mol/L (c*i giver koncentration partikler)

Van't Hoff faktor i forventes at være $i=2$

$$\Pi = cRTi = 0,158 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \times 0,082 \frac{\text{L atm}}{\text{K mol}} \times 298 \text{ K} \times 2 = 7,7 \text{ atm}$$

Dialyse bruger en membran hvor vand og små affaldsstoffer kan diffundere igennem, celler og store biomolekyler gør ikke.



26050 Kemi for Life Science

- 1 Kemisk regning, periodisk system, navngivning
- 2 Reaktioner
- 3 Elektroner, orbitaler og periodiske trends
- 4 Bindinger
- 5 Energi
- 6 Faste stoffer og opløsninger
- 7 Reaktionskinetik**
- 8 Ligevægt
- 9 Ligevægtsberegninger
- 10 Drivkraft af kemiske reaktioner
- 11 Kernekemi
- 12 Overgangsmetaller og komplekser
- 13 Organisk og biologisk kemi

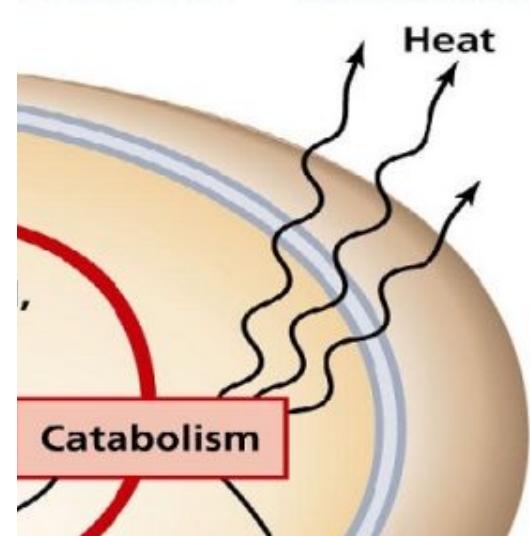
Er sukker (u)stabil?

Hvor hurtigt?



Hvordan?

$$\Delta H = -2545 \text{ kJ}$$

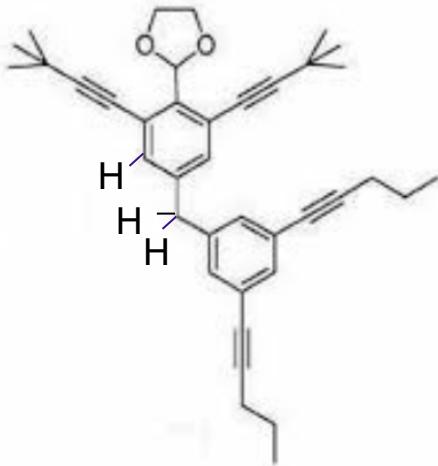


kinetisk stabil

men egentlig ustabil

Først recap

11 -Quiz "Verdens lykkeligste molekyle" har 8 sp-hybridiserede atomer i



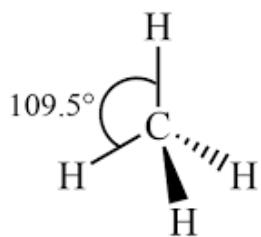
arme og benne ←

hovedet

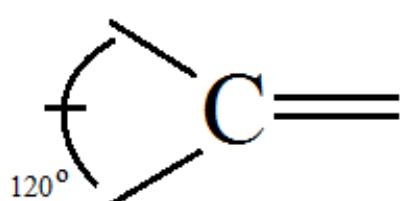
overkrop

hoften

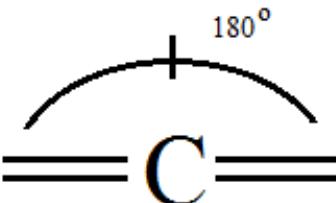
	C
Valenselektroner	4
Antal bindinger	4



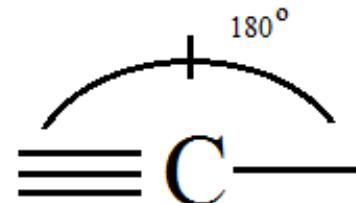
*sp*³



*sp*²



sp



sp

$$\Pi = (\text{antal partikler per volumen}) * RT$$

A. Osmotisk tryk 0,158 M NaCl ved 25 °C?

$$\Pi = cRTi$$

Antal partikler= 0,158 mol/L*2 ("316 mOsm")

B. Osmotisk tryk for en dialysevæske?

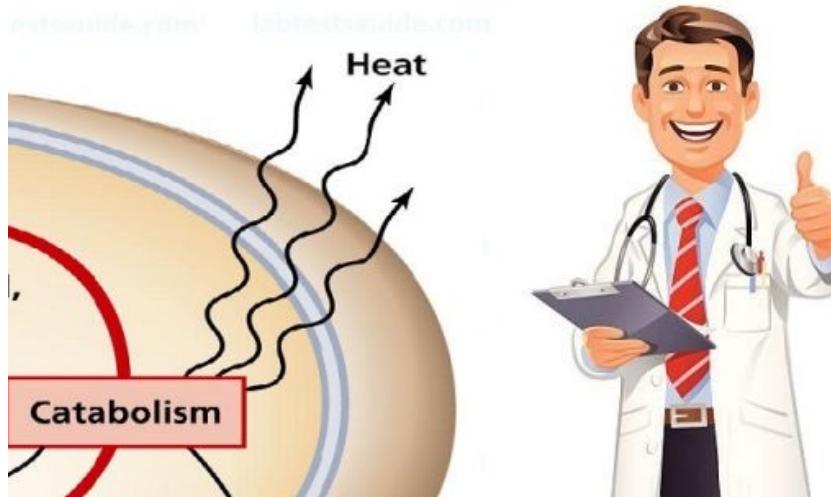
Antal partikler per volumen fra tabellen (sum).

Table 13.5 Composition of a Typical Hemodialysis Solution

Substance	Concentration
Na ⁺	137 mmol/L
Cl ⁻	105 mmol/L
Ca ²⁺	3.0 mmol/L
CH ₃ COO ⁻	4.0 mmol/L
K ⁺	2.0 mmol/L
HCO ₃ ⁻	33 mmol/L
Mg ²⁺	0.75 mmol/L
Dextrose (C ₆ H ₁₂ O ₆)	1.11 mmol/dL

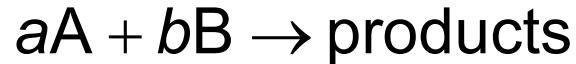
7.1 Reaktionshastighed

Stigningen i koncentrationen af et produkt pr. tidsenhed eller faldet i koncentrationen af en reaktant pr. tidsenhed (normeret med de støkiometriske koefficienter).



Positiv værdi med enhed $M/s = Ms^{-1}$!

Hastighedsudtrykket viser reaktionshastighedens afhængighed af koncentrationen for hver reaktant

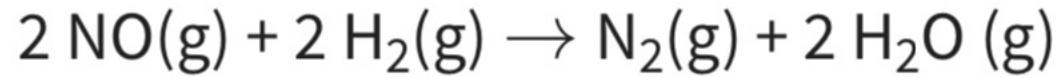


$$\text{rate} = k[A]^m[B]^n$$

k hedder **hastighedskonstant**, modsat hastighed er hastighedskonstanten konstant gennem reaktionsforløbet.

Positiv værdi!

Bestemmelse af eksponenterne i hastighedsudtrykket samt k ved Initial rate metode/isolationsmetoden



$$\text{hastighed} = k \cdot [\text{NO}]^m \cdot [\text{H}_2]^n$$

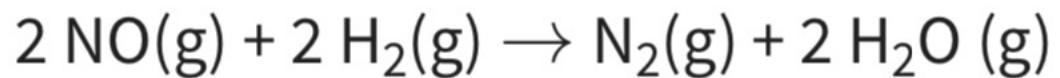
Effekt af fordobling af start-koncentrationen for en reaktant

**Hvis starthastigheden
stiger med** **så er reaktionsorden
for reaktanten**

1	0
2	1
4	2

etc.

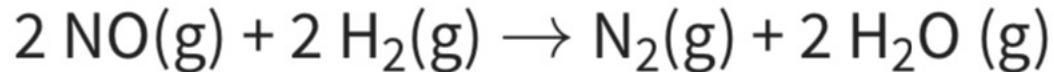
$$\frac{\text{startkonzentration}_2}{\text{startkonzentration}_1} = \left(\frac{\text{startkonzentration}_2}{\text{startkonzentration}_1} \right)^{\text{reaktionsorden}}$$



$$\text{hastighed} = k \cdot [\text{NO}]^m \cdot [\text{H}_2]^n$$

Sammenlign starthastighederne med ændringer i start-koncentrationer af **en reaktant ad gangen**:

$[\text{NO}] (\text{M})$	$[\text{H}_2] (\text{M})$	Starthastighed (initial rate) (M/s)
0,005	0,002	$1,3 \times 10^{-5}$
0,01	0,002	$5,2 \times 10^{-5}$
0,01	0,004	$10,4 \times 10^{-5}$

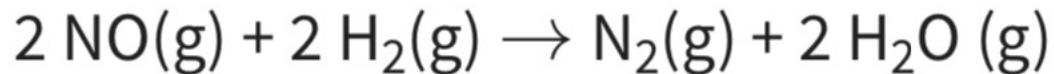


$$\text{hastighed} = k \cdot [\text{NO}]^2 \cdot [\text{H}_2]^n$$

Koncentrationen af NO fordobles, koncentrationen af H₂ forbliver konstant, og hastigheden firedobles.



[NO] (M)	[H ₂] (M)	Starthastighed (initial rate) (M/s)
0,005	0,002	$1,3 \times 10^{-5}$
0,01	0,002	$5,2 \times 10^{-5}$
0,01	0,004	$10,4 \times 10^{-5}$



$$\text{hastighed} = k \cdot [\text{NO}]^2 \cdot [\text{H}_2]^1$$

Koncentrationen af H₂ fordobles, koncentrationen af NO forbliver konstant, og hastigheden fordobles.



[NO] (M)	[H ₂] (M)	Starthastighed (initial rate) (M/s)
0,005	0,002	$1,3 \times 10^{-5}$
0,01	0,002	$5,2 \times 10^{-5}$
0,01	0,004	$10,4 \times 10^{-5}$

Med hastighedsudtrykket og hastighed for givne koncentrationer [NO] og [H₂] kan vi beregne k

$$\text{hastighed} = k[\text{NO}]^2[\text{H}_2]^1$$

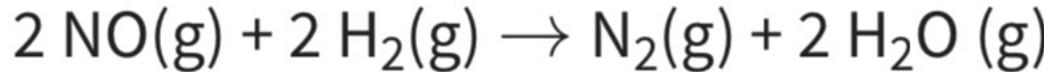


[NO] (M)	[H ₂] (M)	Starthastighed (initial rate) (M/s)
0,005	0,002	$1,3 \times 10^{-5}$

$$1,3 \times 10^{-5} \text{ M/s} = k \cdot [0,005 \text{ M}]^2 \cdot [0,002 \text{ M}]^1$$

$$k = 1,3 \cdot 10^{-5} \text{ M/s} / ([0,005 \text{ M}]^2 \cdot [0,002 \text{ M}]) = 260 \text{ M}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

Eksponenterne i hastighedsudtrykket behøves ikke være de samme som de støkiometriske koefficienter i den afbalanceerde kemiske ligning til reaktionen.



$$\text{hastighed} = k \cdot [\text{NO}]^2 \cdot [\text{H}_2]$$

Reaktionsorden er

- 2 mht NO koncentrationen
- 1 mht H₂ koncentrationen

Sammenlagt reaktionsorden er

- 2 + 1 = 3 (summen af alle eksponenter for koncentrationer i hastighedsudtrykket)

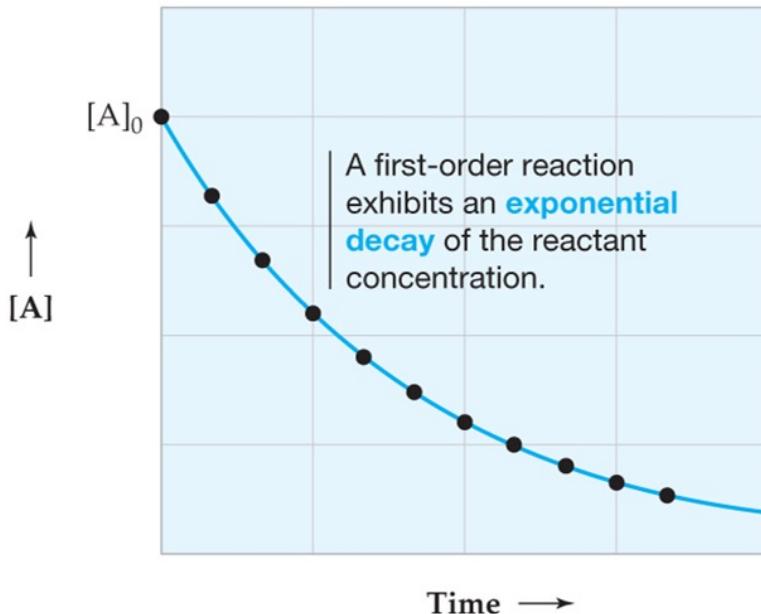
Reaktionsorden kan også bestemmes fra plots af koncentration versus tid ("integrereret hastighedsudtryk")

$$\text{rate} = -\frac{d[A]_t}{dt} = k[A]_t$$

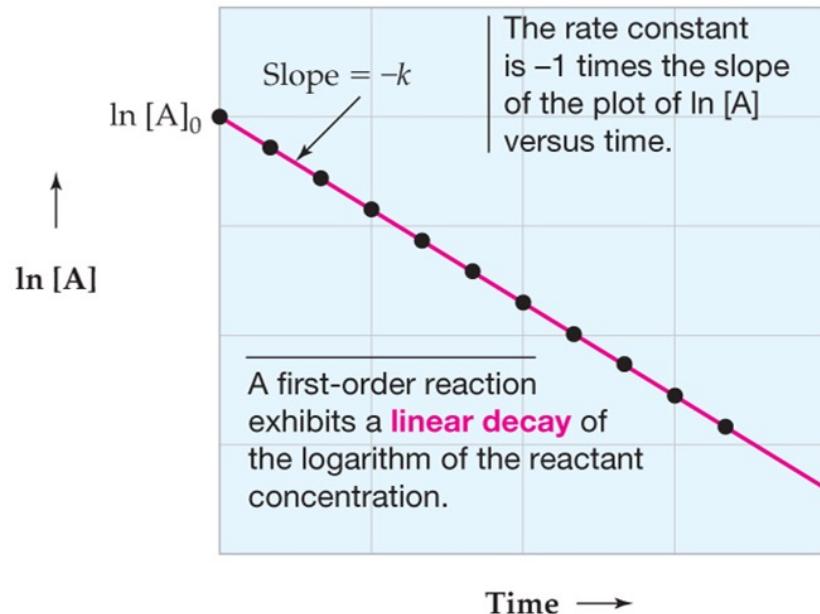
kan løses for $[A]_t = [A]_0 \cdot e^{-kt}$

$$\ln[A]_t = \ln[A]_0 - k \cdot t$$

(a) Reactant concentration versus time

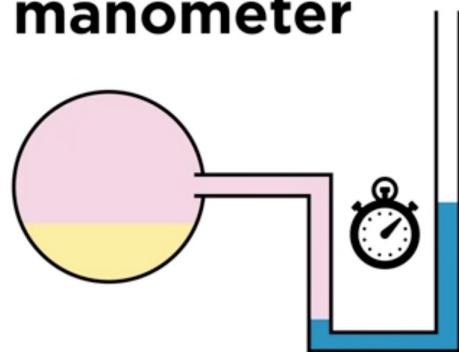


(b) Natural logarithm of reactant concentration versus time

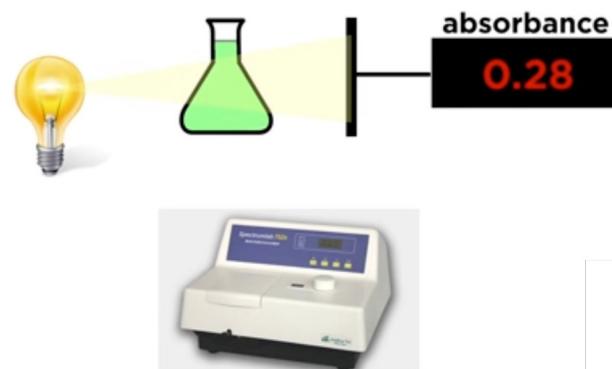


Hvordan kan man følge reaktioner og deres hastighed over tid?

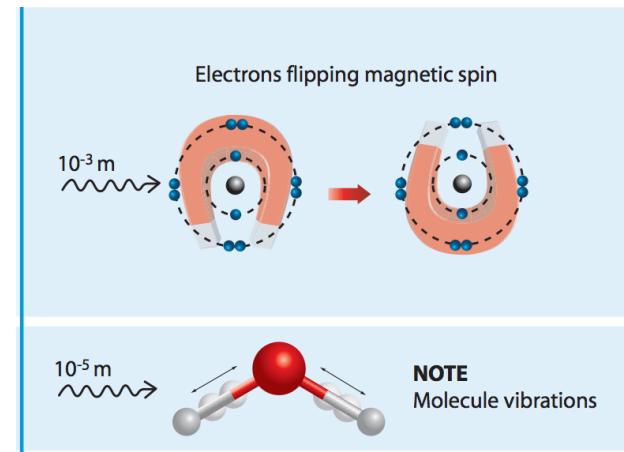
manometer



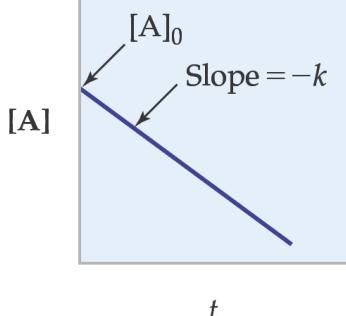
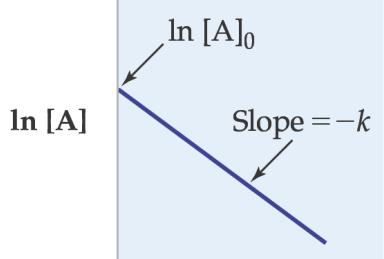
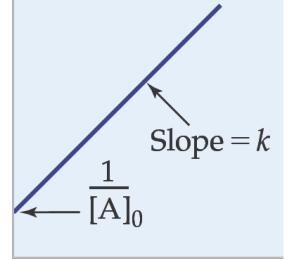
tryk



UV/VIS spektroskopi
(spektrofotometer)



NMR spektroskopi
IR spektroskopi
(forandring i bindingerne)

	0. Orden	1. Orden	2. Orden
Hastighedsudtryk (hastighed som funktion af $[A]$)	$-\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k$	$-\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k[A]$	$-\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k[A]^2$
Integrator hastighedsudtryk	$[A]_t = -kt + [A]_0$	$\ln[A]_t = -kt + \ln[A]_0$ $[A]_t = [A]_0 e^{-kt}$	$\frac{1}{[A]_t} = kt + \frac{1}{[A]_0}$
Linear plot	$[A]$ versus t	$\ln[A]$ versus t	$\frac{1}{[A]}$ versus t
			
Enhed for hastighedskonstanten k	$M/s = M \cdot s^{-1}$	s^{-1}	$M^{-1} \cdot s^{-1}$

7.2 Molekylær tolkning og energi i reaktionsforløbet:

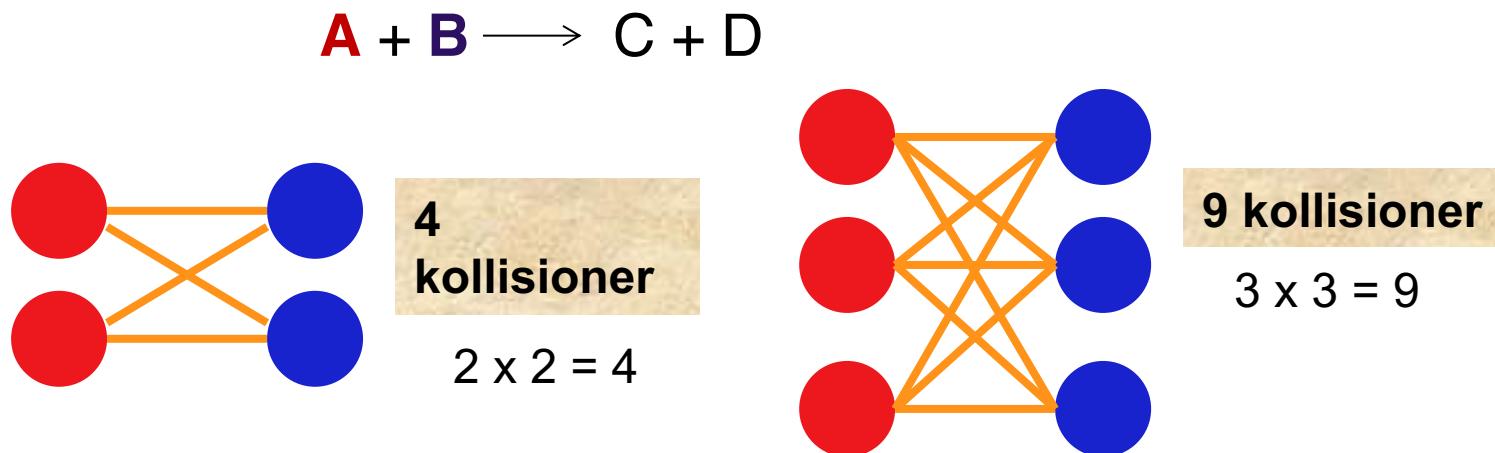
Kollisionsteori

Aktiveringsenergi og Arrhenius ligning

Reaktionsmekanisme

Faktorer, der påvirker reaktionshastigheden

- 1) Koncentration af reaktanter
- 2) Temperatur
- 3) Tilstedeværelse af en katalysator
- 4) Overflade
- 5) Omrøring
- 6) Reaktanternes kemiske natur



Faktorer, der påvirker reaktionshastigheden

Kollisionsteori: For at en reaktion kan finde sted, skal atomerne eller molekylerne

(1) kolidere (2) i den rigtige retning og (3) med nok energi.

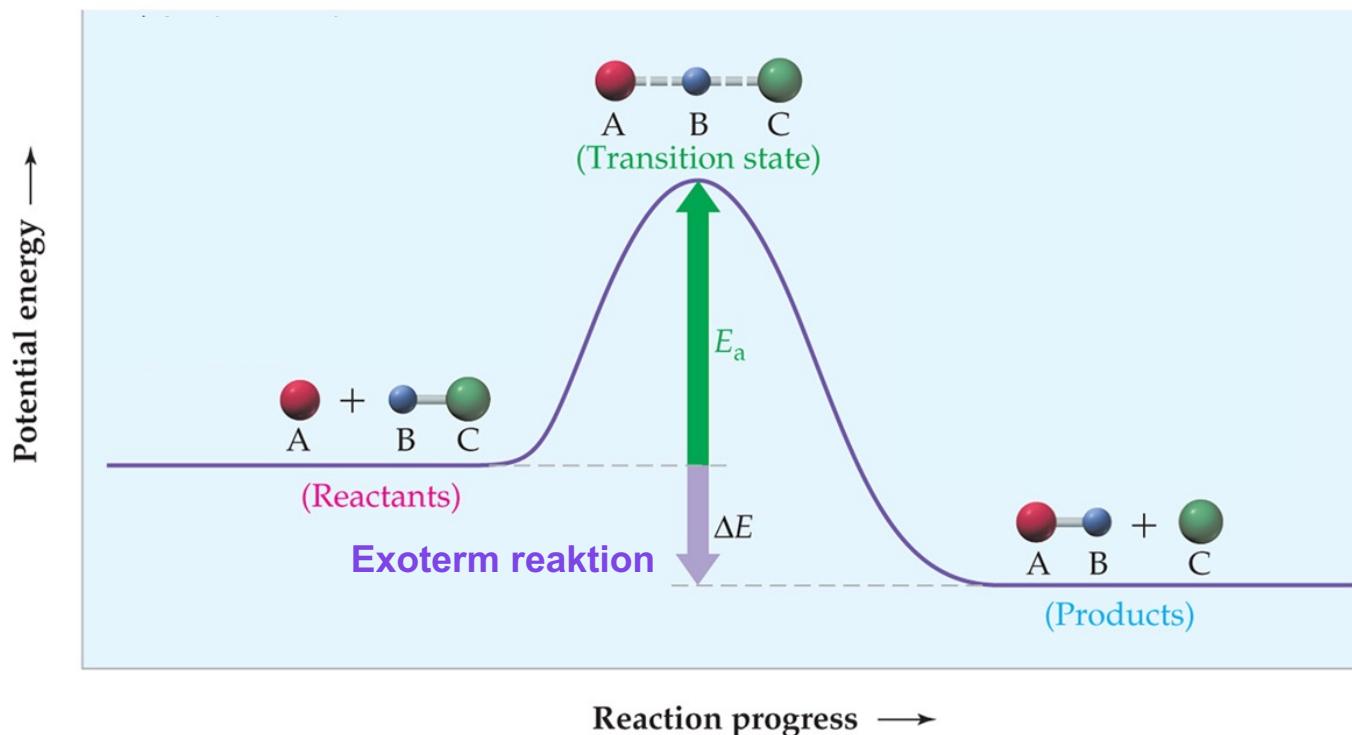


"overgangstilstand"

Energidiagrammer af reaktionsforløbet

Overgangstilstand: maksimum i den potentielle energiprofil.

Dette kaldes også det “aktiverede kompleks” $[ABC]^*$.

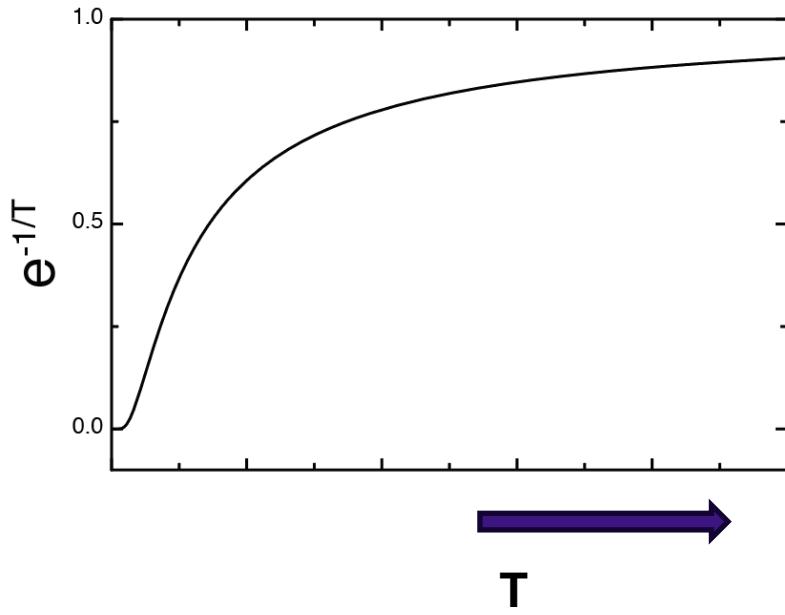


Aktiveringsenergien E_a : er forskellen i kemisk energi mellem overgangstilstand og reaktanter; positiv værdi

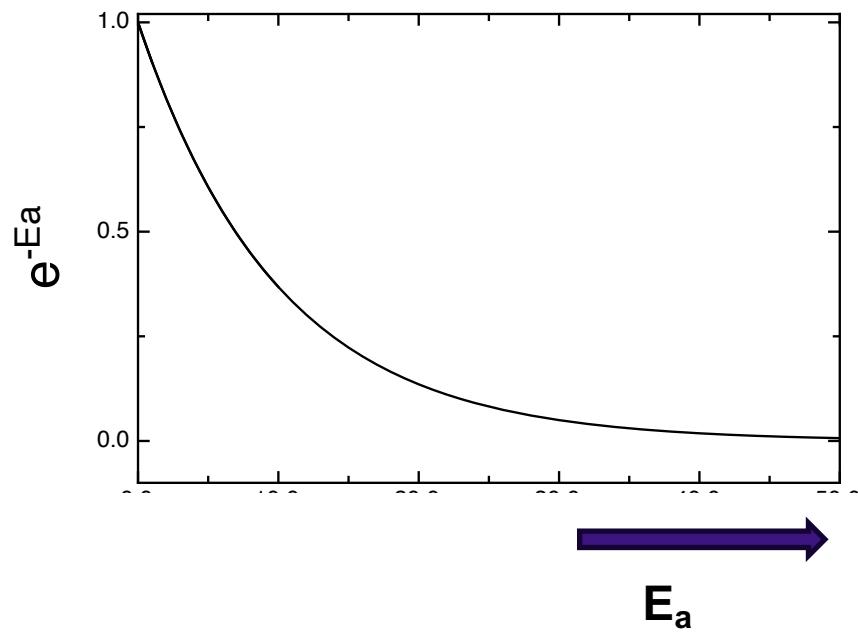
Når **temperaturen** stiger, øges den gennemsnitlige molekylære hastighed, og dermed stiger kollisionshastigheden (samt hastigheds-konstanten og reaktionshastighed).

Hastighed(skonstant)

stiger med temperatur



falder med større aktiveringsenergi



Når E_a stiger, er reaktionen langsommere pga større barriere

Temperatur-afhængighed af hastighedskonstanten beskrives med Arrhenius ligningen

$$k = A e^{-E_a/RT}$$

k Hastighedskonstant

A Kollisionsfrekvensfaktor

E_a Aktiveringsenergi

R Gaskonstant (8,314 J/(K•mol))

T Temperatur (K)

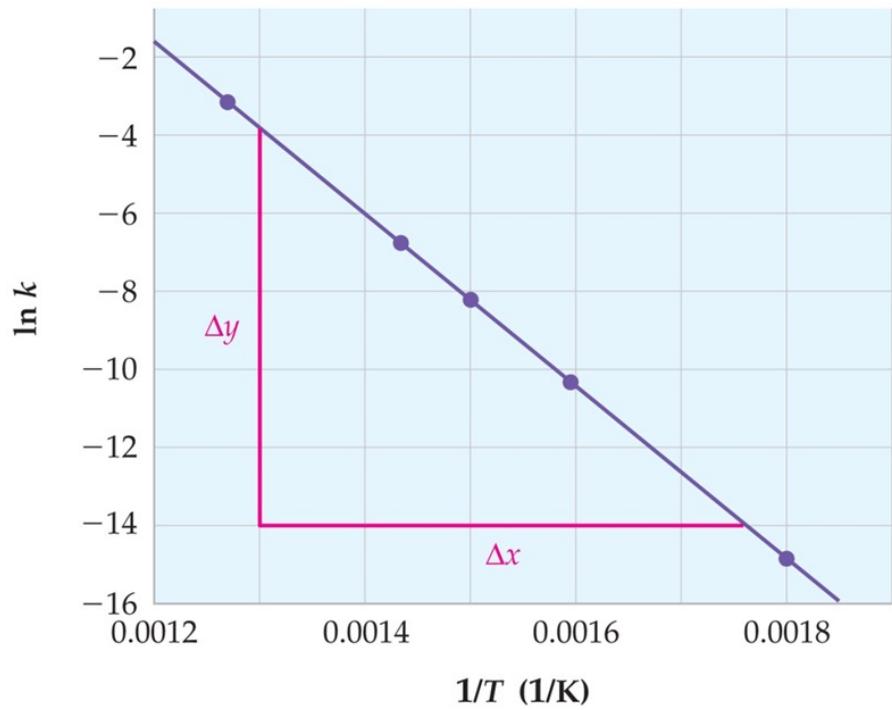
(OBS: E_a er ofte i kJ/mol, mens gaskonstanten indeholder J

Aktiveringsenergien kan bestemmes med et lineært plot af $\ln(\text{hastighedskonstant})$ vs $1/T$

$$\ln(k) = \left[\frac{-E_a}{R} \right] \left[\frac{1}{T} \right] + \ln(A)$$

$$y = mx + b$$

Hældningen er $-E_a/R$



Sammenligning af hastighedskonstanter ved 2 forskellige temperaturer kan direkte give aktiveringsenergien

$$k_1 = A \cdot e^{-E_a/RT_1}$$

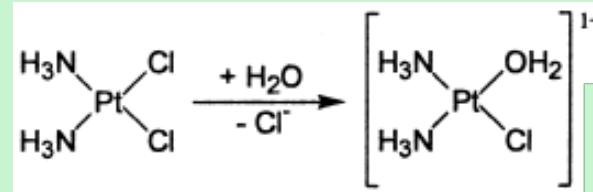
$$k_2 = A \cdot e^{-E_a/RT_2}$$

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{R} \cdot \left(\frac{T_1 - T_2}{T_1 \cdot T_2} \right)$$

Brug T_2 = laveste temperatur, T_1 = højeste temperatur
 k_1/k_2 er stigning i reaktionshastighed

k_1/k_2 er større end 1; E_a er større end 0 kJ/mol

En reaktion af anticancer-lægemidlet cisplatin, $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$ med vand er beskrevet i følgende reaktionsligning:



Hastigheden af reaktionen stiger med en faktor 15, når temperaturen øges fra 25 °C til 50 °C. Hvad er værdien for aktiveringsenergien i kJ/mol?

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{R} \cdot \left(\frac{T_1 - T_2}{T_1 \cdot T_2} \right)$$

Brug T_2 = laveste temperatur, T_1 = højeste temperatur
 k_1/k_2 er stigning i reaktionshastighed

$$k_1/k_2 = 15; T_1 = 323 \text{ K}; T_2 = 298 \text{ K}; R = 8,314 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$$

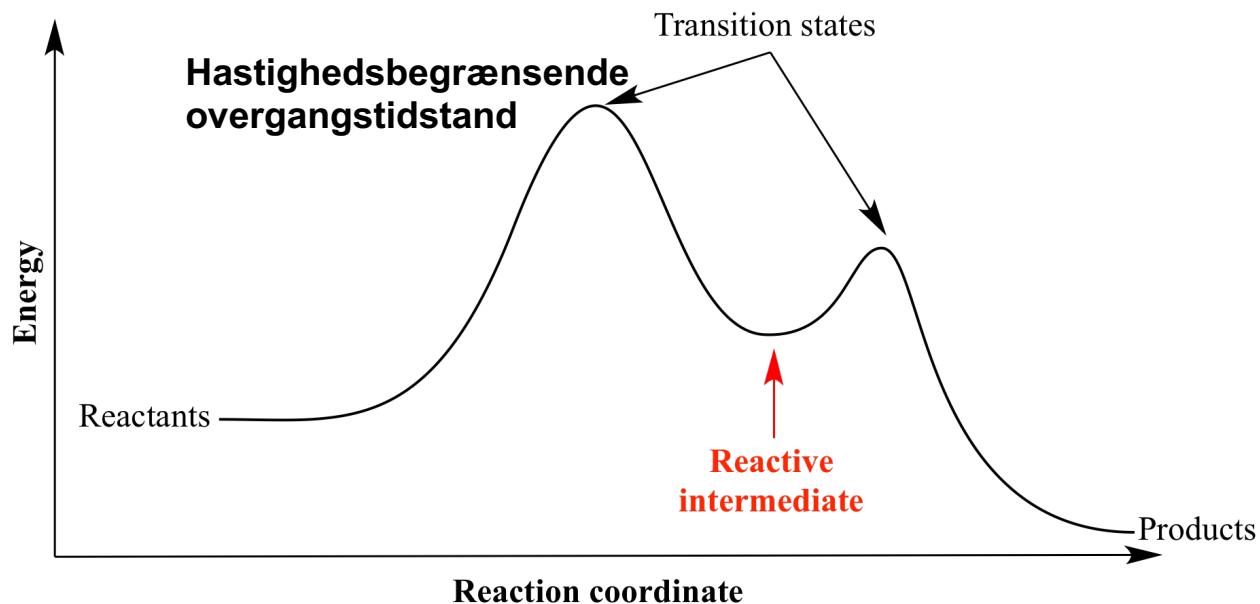
Kun E_a er ukendt, løs for E_a ($= 86000 \text{ J/mol} = 86 \text{ kJ/mol}$)

Reaktionsmekanisme og trin

Reaktionsmekanisme: En sekvens af reaktionstrin, der beskriver vejen fra reaktanter til produkter

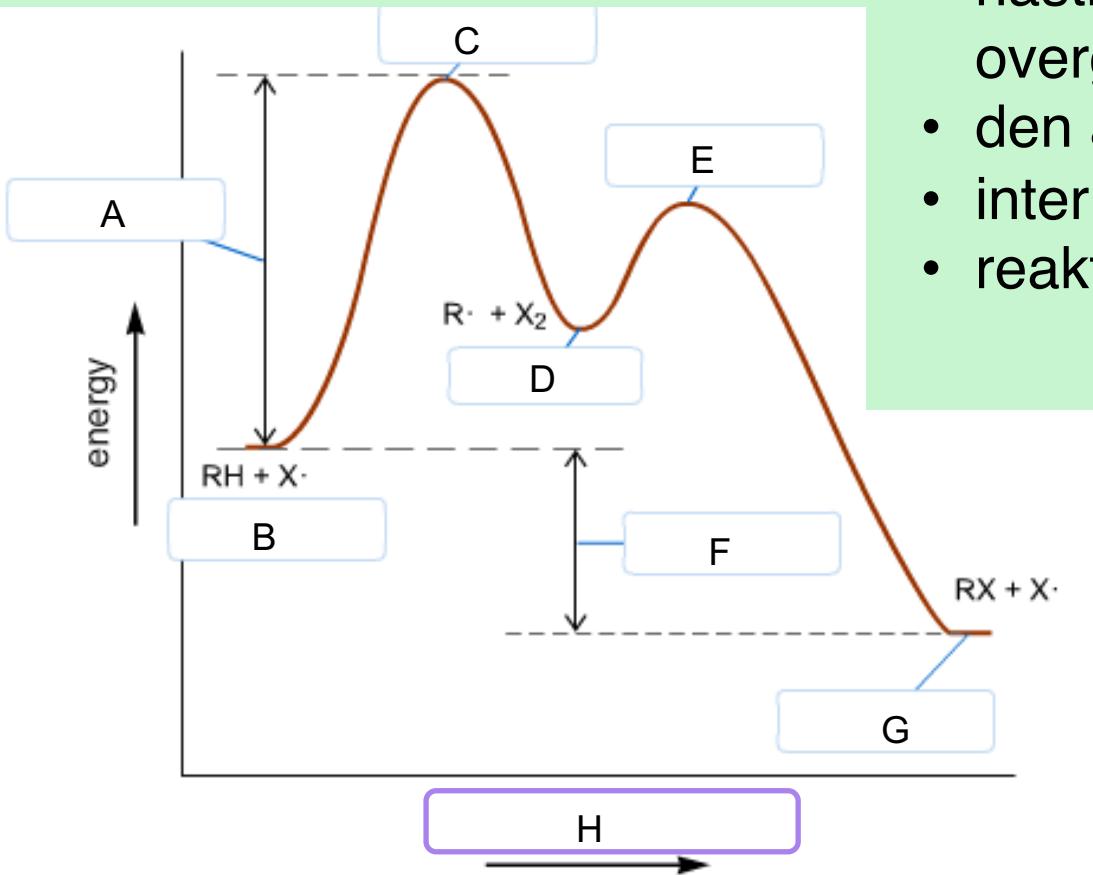
Elementær reaktion (trin): Et enkelt trin i en reaktionsmekanisme

Trinnet med den højeste aktiveringsenergi er **hastighedsbegrænsende** og bestemmer hastighedsudtrykket.

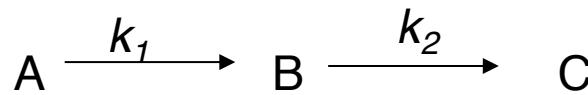


Hvad er

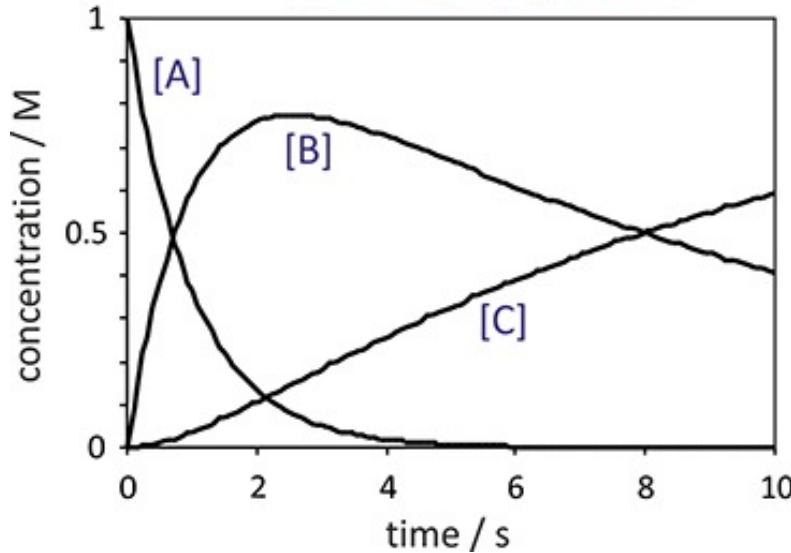
- substrater/reaktanter
- produkter
- aktiveringesenergi
- reaktionsentalpi
- hastighedsbegrænsende overgangstilstand
- den anden overgangstilstand
- intermediat
- reaktionskoordinat



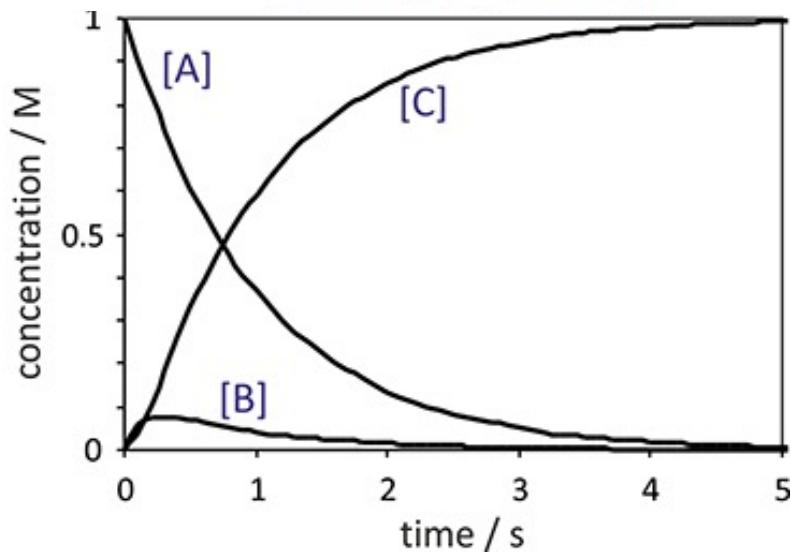
Reaktioner kan bestå af flere elementære trin



$$k_1 >> k_2$$

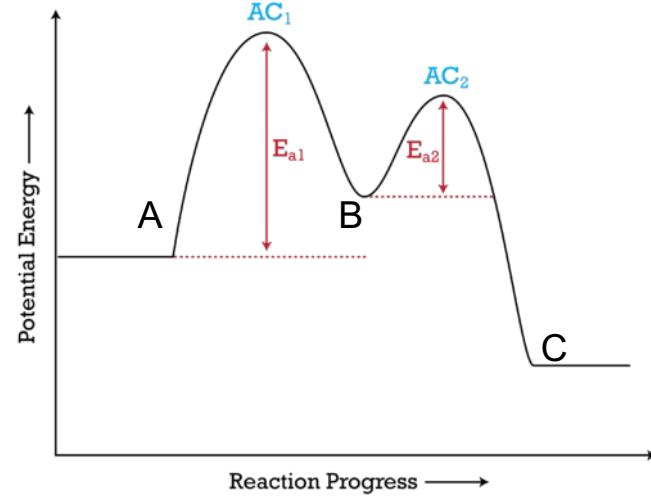


$$k_2 >> k_1$$



Intermediat B vil akkumulere, hvis hastighedskonstanten for dens dannelsel er højere end for dens videre reaktion.

Hvilken af disse reaktioner har følgende energidiagram?

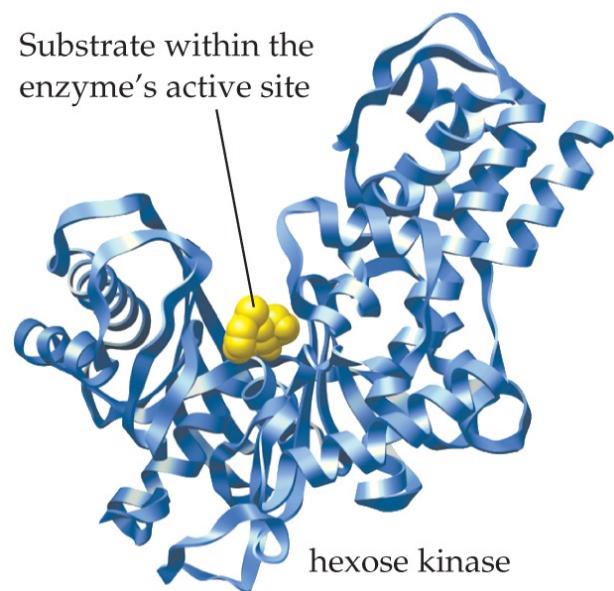
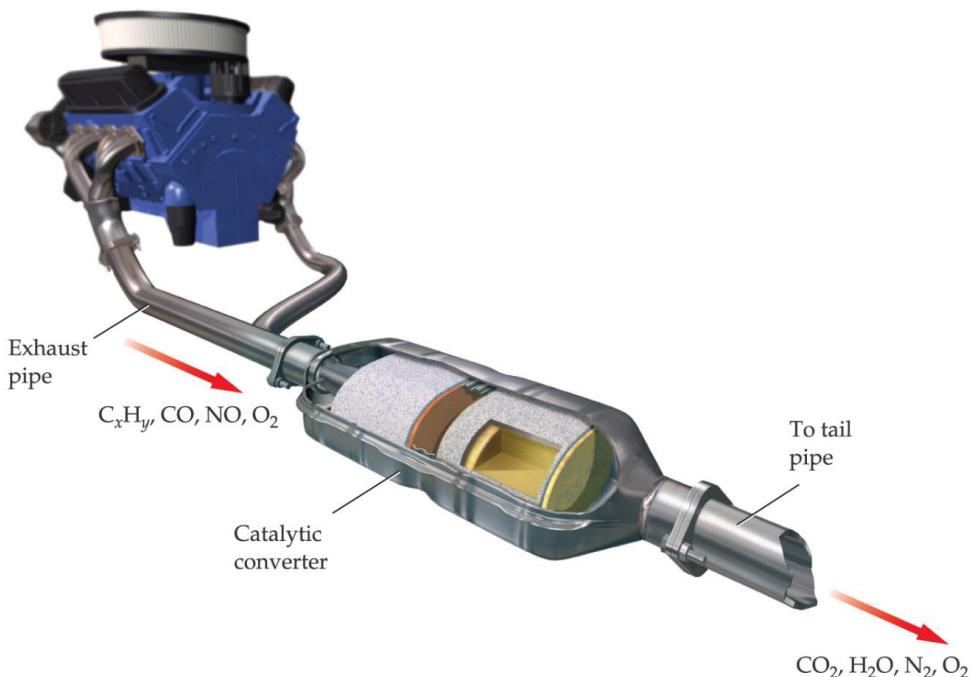


7.3 Applikationer (eksempler):

- A. Katalyse
- B. Kulstof 14-datering og andre omregninger mellem omdannelse og tid.

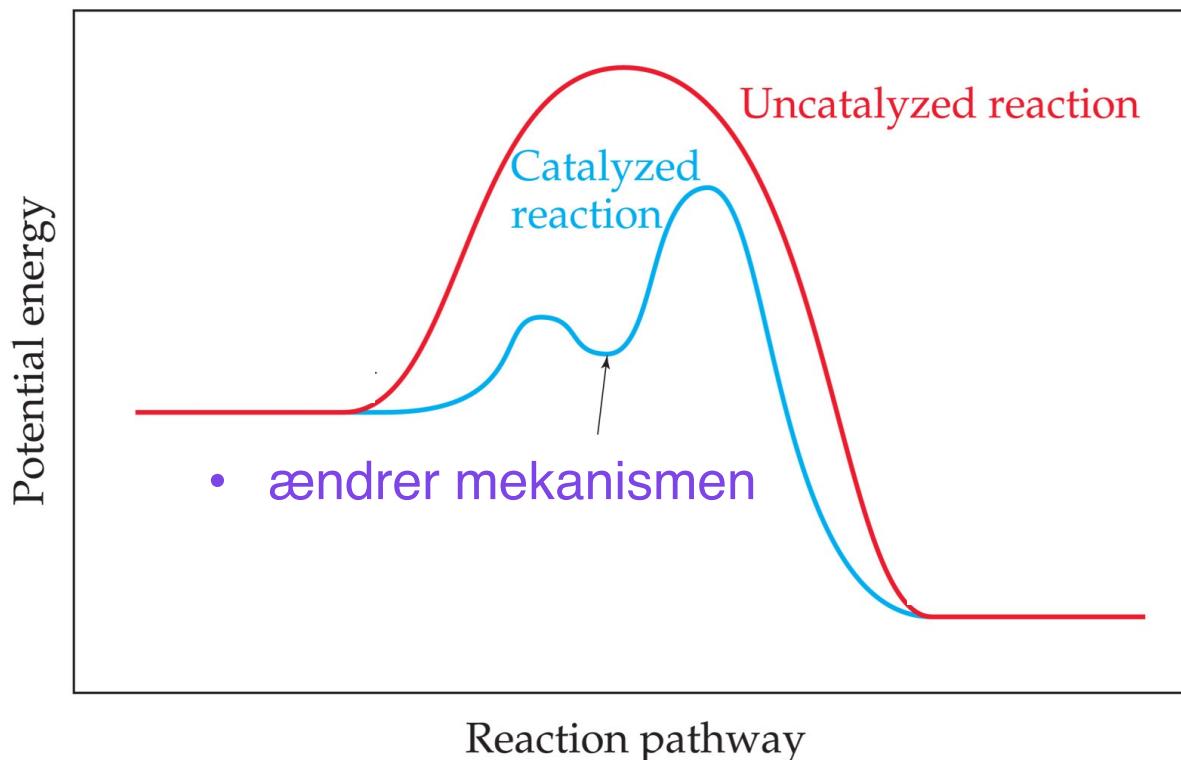
A. Katalyse

Katalysator: Et stof, der øger hastigheden af en reaktion uden selv at blive omdannet i reaktionen. En katalysator anvendes i et trin og regenereres i et senere trin.



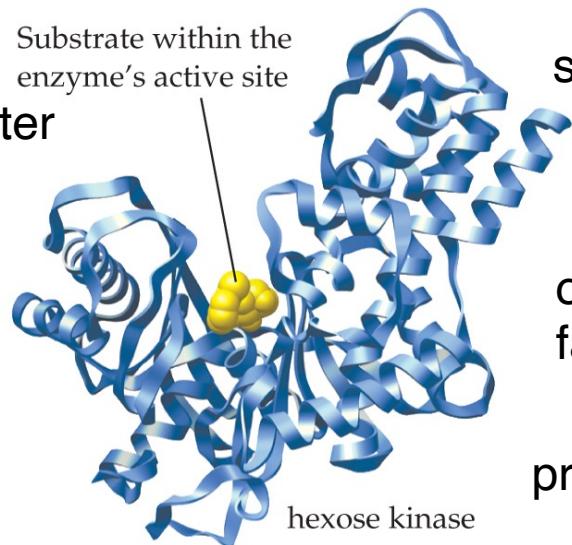
Effekt af katalysatorer på reaktionshastighed

- øger reaktionshastigheden ved at reducere reaktionens aktiveringsenergi.
- ændrer **ikke** energiforskellen mellem produkterne og reaktanterne.
- bliver **ikke** forbrugt og **indgår** ikke i støkiometrisk ligning



Biokatalysatorer kaldes for enzymer, reaktanterne for deres "substrat"

høj effektivitet; få substrater



snævert vindue af betingelser

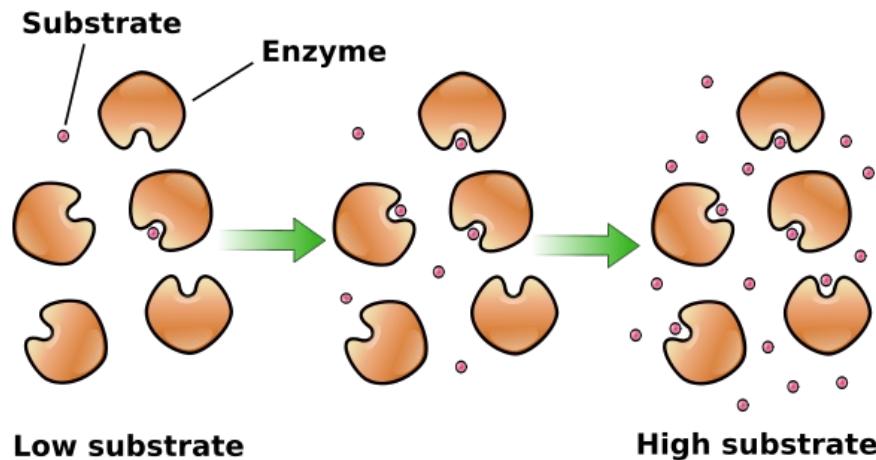
oftest i samme
fase som reaktant og produkt

proteiner

høj hastighed (op til millioner reaktioner per sekund)

Michaelis-Menten enzymkinetik med substrat S:

Hastiged afhænger af substratkonzcentrationen til et punkt,
hvor enzymet uafbrudt arbejder



$$\text{Reaktionshastigheden kaldes } V = - \frac{\Delta[S]}{\Delta t}$$

Michaelis-Menten ligning beskriver sammenhæng mellem reaktionshastigheden og reaktantkoncentration $[S]$

maksimalhastighed

$$V = \frac{V_{\max} [S]}{K_M + [S]}$$

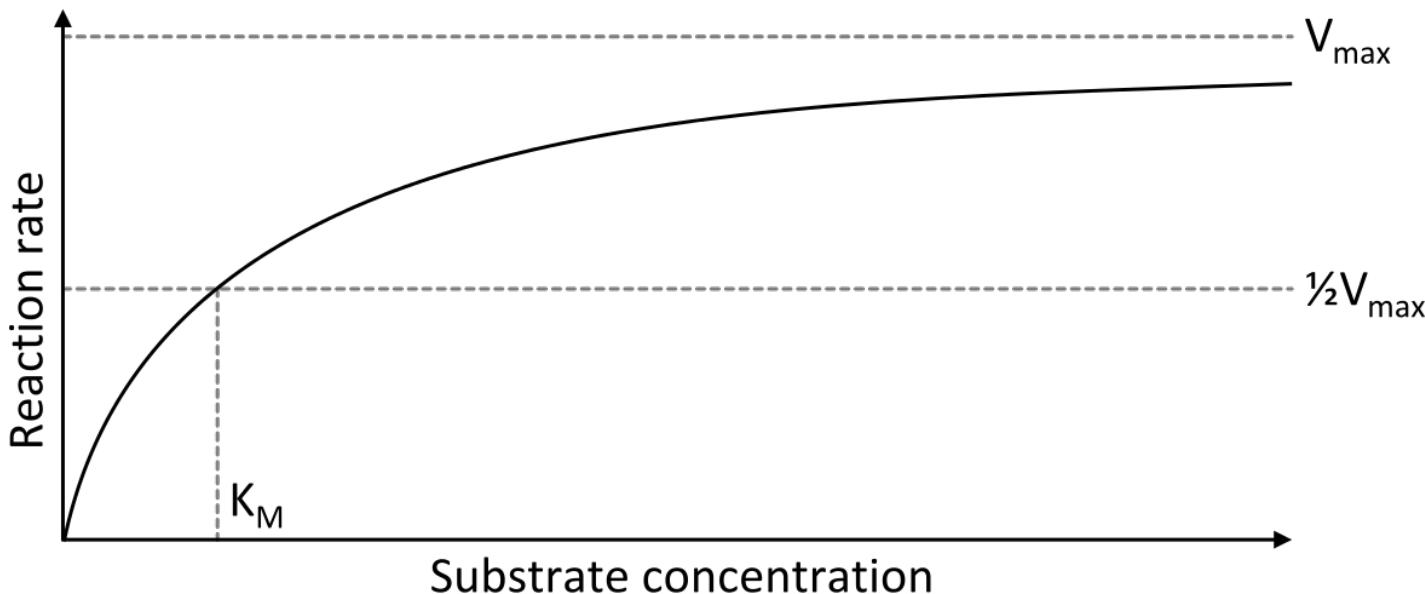
$$\frac{V}{V_{\max}} = \frac{[S]}{K_M + [S]}$$

Michaelis Menten konstant
substratkonzentrationen der fører til halv
maksimal hastighed

Michaelis-Menten enzymkinetik

K_M beskriver enzymets bindingsevne for substratet

K_M er ofte i størrelsesorden mM



V_{max} er maksimalhastigheden-reaktionshastigheden er konstant, dvs koncentrations-uafhængig (0. orden) ved høj nok $[S]$

Eksempel: For hvilken substrakoncentration kører enzymreaktionen med 80% (=0,8 gange) maximal hastighed?

$$\frac{V}{V_{max}} = \frac{[S]}{K_M + [S]} = 0,8$$

$$[S] = 4 \times K_M$$

$$V = V_{max} \frac{4 \times K_M}{K_M + 4 \times K_M} = 0,8 \times V_{max}$$

Eksempel: Hvilket K_M for substratet har et Michaelis-Menten enzym, hvis V/V_{max} er 0,25 for 10 mM substratkonzentration?

$$\frac{V}{V_{max}} = \frac{[S]}{K_M + [S]}$$

$$0,25 = \frac{10 \text{ mM}}{K_M + 10 \text{ mM}}$$

løs for K_M (=30 mM)

B. Tid det tager at omdanne reaktanten i en 1. ordens reaktion:



$$[A]_t = [A]_0 e^{-kt}$$

$$[A]_t/[A]_0 = e^{-kt}$$

*hvis man kender
hastighedskonstanten*

$$t = -\ln\left(\frac{[A]_t}{[A]_0}\right) \cdot \frac{1}{k}$$

tid

**andel A
tilbage**

hastighedskonstant

*hvis man kender
"halveringstid" $t_{1/2}$*

$$t = -\ln\left(\frac{[A]_t}{[A]_0}\right) \cdot \frac{t_{1/2}}{0,693}$$

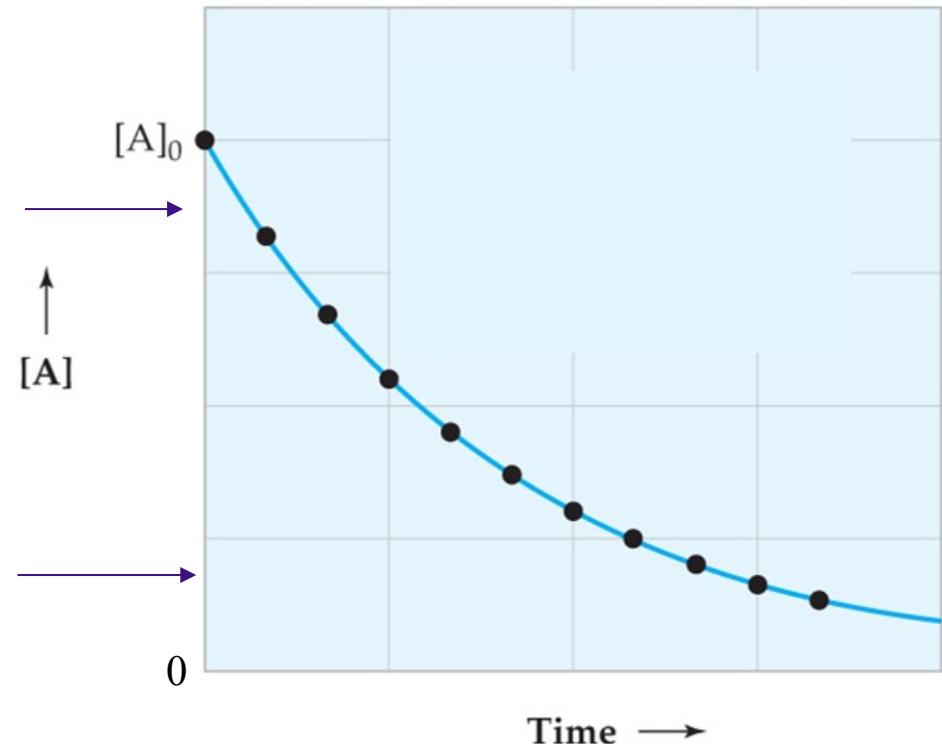
$$t_{1/2} = -\ln\left(\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{1}{k} = 0,693 \cdot \frac{1}{k}$$

10% A omdannet: 90% tilbage

$$[A]_t/[A]_0 = 0,9$$

80% A omdannet: 20% tilbage

$$[A]_t/[A]_0 = 0,2$$



Eksempel: Omdannelsen af cyklopropan forløber i en førsteordensreaktion med hastighedskonstant $k = 6,71 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Bestem hvor lang tid det tager for at konvertere 72 % cyklopropan til propen.

Førsteordensreaktion

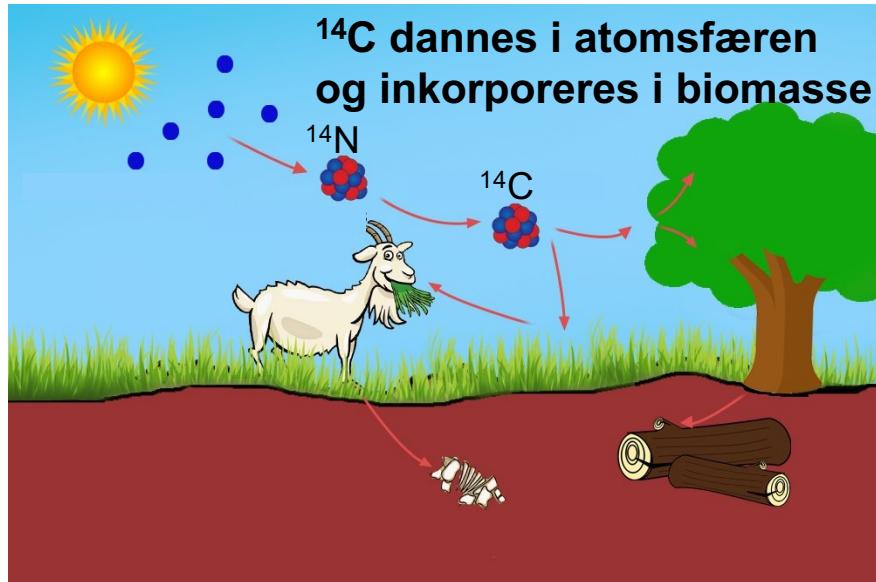
$$t = -\ln \left(\frac{[A]_t}{[A]_0} \right) \cdot \frac{1}{k}$$

[cyklopropan]_t/[cyklopropan]₀=0,28 (72% omdannet, 28% tilbage)

beregn tiden t med $k = 6,71 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$

$$t = -\ln(0,28) \cdot \frac{1}{k} = 1897 \text{ s} (=32 \text{ min})$$

Radioaktive kerners henfald er 1.orden: Kulstof 14-datering bruger ^{14}C henfald



Når dyr eller planter holder op med at have stofskifte,
bliver ^{14}C ikke inkorporeret længere og henfalder

$$\frac{N}{N_0} = e^{-kt}$$

Tid siden ^{14}C blev
inkorporeret i biomasse:

$$t = -\ln\left(\frac{N}{N_0}\right) \cdot 8267 \text{ år}$$

N =antal ^{14}C på tidspunkt t

N_0 =antal ^{14}C , hvis prøven var ny

Generelt

$$t = -\ln\left(\frac{N}{N_0}\right) \cdot \frac{t_{1/2}}{0,693}$$

$t_{1/2}$ =halveringstid
som man får oplyst

Brachyterapi er en speciel form for intern strålebehandling, der typisk anvendes til behandling af kræft. Strålingen stammer her fra radioaktive kilder såsom iod-125 der placeres i tumoren. Hvornår er 90% af iod-125 forbrugt, hvis den har en halveringstid på 59,5 d.

$$\frac{N}{N_0} = \text{hvor meget der er tilbage}$$

hvis 90% er forbrugt, er 10% tilbage $\frac{N}{N_0} = 0,1$

Appendix: regneregler for logaritmer

$\ln(x)$ stiger med x

$$\ln(a \times b) = \ln(a) + \ln(b)$$

$$\ln(a/b) = \ln(a) - \ln(b)$$

$$\ln(1) = 0$$

$$\ln(1/b) = -\ln(b)$$

$$\ln(e^x) = x$$

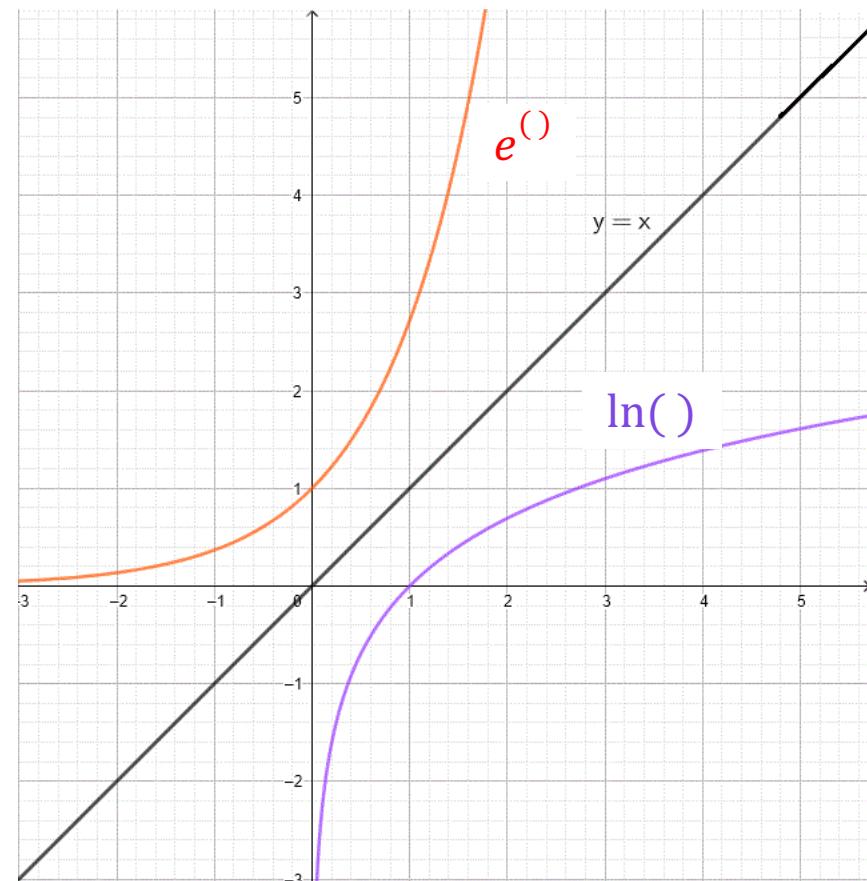
$\ln()$ og e^0 er inverse funktioner

$\log()$ og 10^0 er inverse funktioner

$$\log(10^x) = x$$

Maple: log skrives log10

$\ln(a)$ og $\log(a)$ er positive for $a > 1$



26050 Kemi for Life Science

- 1 Kemisk regning, periodisk system, navngivning
- 2 Reaktioner
- 3 Elektroner, orbitaler og periodiske trends
- 4 Bindinger
- 5 Energi
- 6 Faste stoffer og oplosninger
- 7 Reaktionskinetik
- 8 Ligevægt**
- 9 Ligevægtsberegninger
- 10 Drivkraft af kemiske reaktioner
- 11 Kernekemi
- 12 Overgangsmetaller og komplekser
- 13 Organisk og biologisk kemi

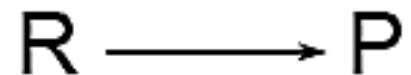
“Et af de vigtigste aspekter af kemi er kemiske reaktioners tendens til at nærme sig ligevægt.

Ligevægtene i kemi er dynamiske: processer i begge retninger fortsætter, men i samme hastighed, så der er ingen nettoændring.

Ligevægte er levende og reagerende tilstade.”

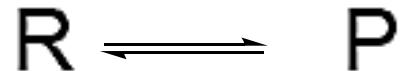
Atkins-Chemical Principles

Kemiske Pile



Reaktant bliver til produkt

Mængden afhænger af de støkiometriske koefficienter



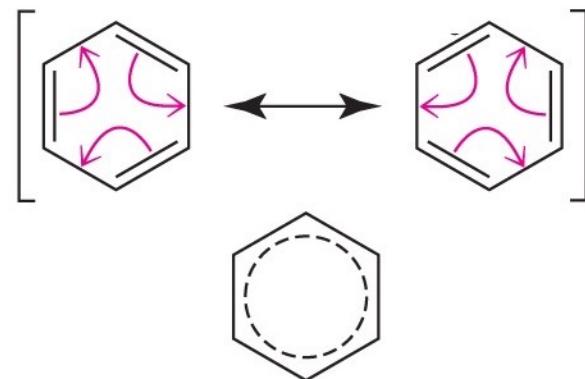
Reaktionen forløber reversibel mellem
reaktant og produkt.

Der indstilles ligevægt.

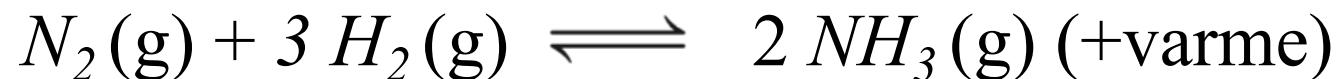
Mængden af R og P i ligevægt afhænger af ligevægtskonstanten;
de støkiometriske koefficienter indgår.

OBS: ligevægtspilen er forskellig fra pilen der beskriver en mellemting mellem flere mulige strukturer (resonans)

Bøjede pile er “elektron-pile” der beskriver bevægelse af elektroner

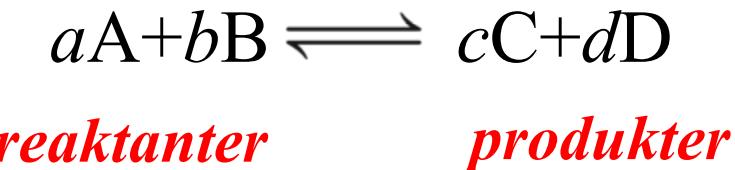


8.1 Reversible reaktioner er dynamiske ligevægte med en defineret ligevægtskonstant



(s), (l), (g) indikerer faste, flydende og gasformige reaktanter,
(aq) beskriver stof i en vandig opløsning

Ligevægtskonstant K_c og K_p beskriver
ligevægtsfordelingen af reaktanter og produkter



*Exponenterne er de støkiometriske koefficienter
fra den afbalanceerde reaktionsligning*

Under ligevægt gælder ligevægtsloven

$$K_c = \frac{[C]_{eq}^c \cdot [D]_{eq}^d}{[A]_{eq}^a \cdot [B]_{eq}^b}$$

produkter
reaktanter

for gasformige reaktanter kan man bruge partialtryk

$$K_p = \frac{p(C)_{eq}^c \cdot p(D)_{eq}^d}{p(A)_{eq}^a \cdot p(B)_{eq}^b}$$

Hvilken reaktion har ligevægtskonstanten

$$K_c = \frac{[C]_{eq}^2 [D]_{eq}^3}{[A]_{eq}^4 [B]_{eq}} ?$$



Helt korrekt indgår "aktiviteterne" som beskriver variabel koncentration i mol/l eller tryk i bar



$$K = \frac{a(c)_{eq}^c \cdot a(d)_{eq}^d}{a(a)_{eq}^a \cdot a(b)_{eq}^b}$$

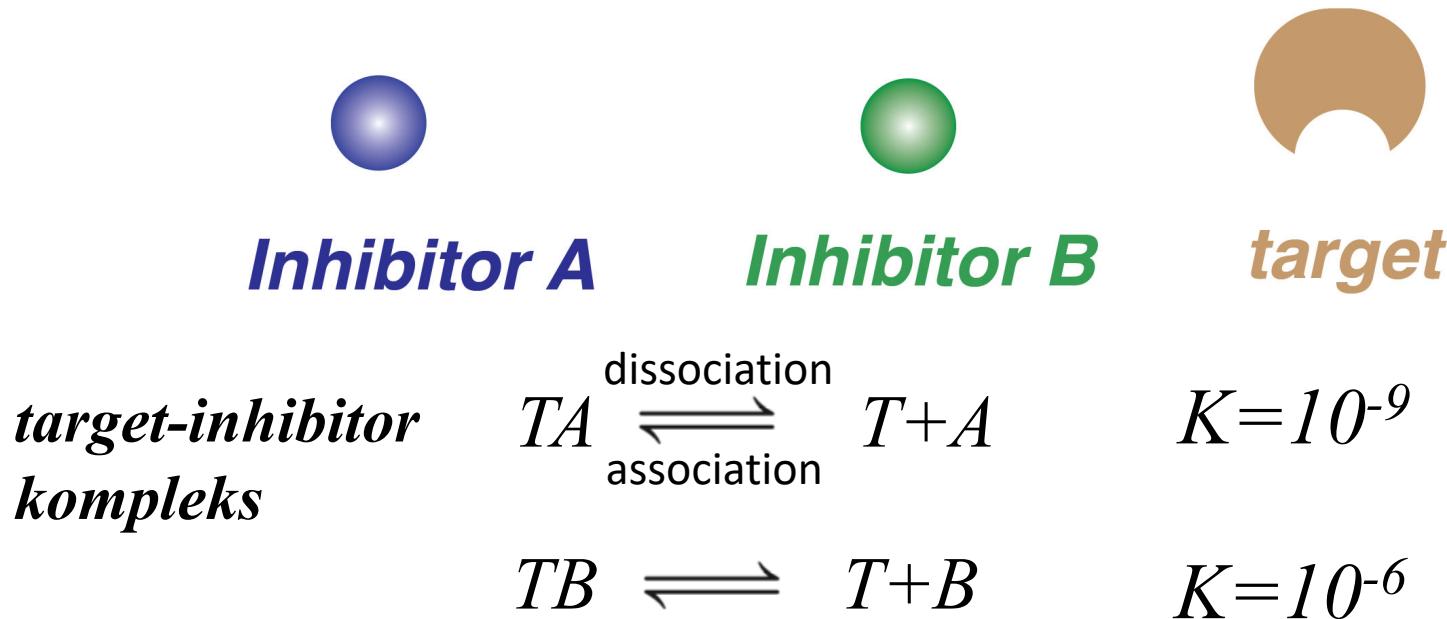
Aktivitet

- af stof med konstant koncentration ((s) eller (l)) er 1; **indgår ikke**
- approksimeres med koncentration i M (mol/l) eller partialtryk i bar

Vi regner med koncentration/M (til K_c) og partialtryk/bar (til K_p)

Ligesom aktivitet har K ingen enhed (og den er altid positiv)

Eksempel: Hvilket lægemiddel inhiberer target-biomolekylet T stærkest?



”dissociationskonstanten” K_d

A binder stærkest



Inhibitor A



Inhibitor B



target



$$K_d = \frac{[T]_{eq} \cdot [A]_{eq}}{[TA]_{eq}} = 10^{-9}$$

"dissociationskonstanten"
lille for en stærk interaktion

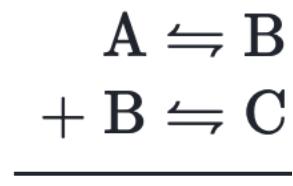


$$K_a = \frac{[TA]_{eq}}{[T]_{eq} \cdot [A]_{eq}} = 1 / K_d = 10^9$$

"associationskonstanten"
stor for en stærk interaktion

Generelt hvis reaktant og produkt bytter plads:
 $K' = 1/K$

I naturen kobles ofte flere ligevægtsreaktioner sammen der deler nogle reaktanter eller produkter:



$$K_1 = \frac{[B]}{[A]}$$

$$K_2 = \frac{[C]}{[B]}$$

$$K_{sumreaktion} = K_1 \cdot K_2$$

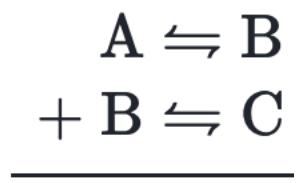
$$K_{sumreaktion} = \frac{[B]}{[A]} \cdot \frac{[C]}{[B]} = \frac{[C]}{[A]}$$

I ligningen for sumreaktionen lægges venstre siderne sammen, og også højre siderne; så forkortes der (man kan trække det samme fra på begge sider)

Vi kender ligevægtskonstanten for to hypotetiske reaktioner i stofskifte:



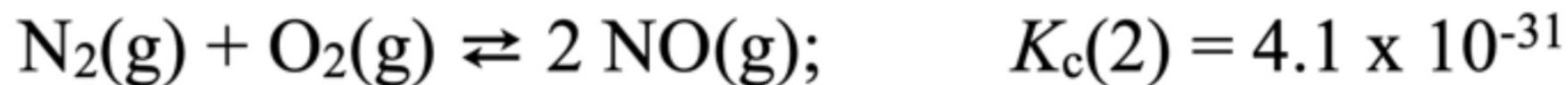
Hvad er ligevægtskonstanten for reaktionen $A \rightleftharpoons C$?



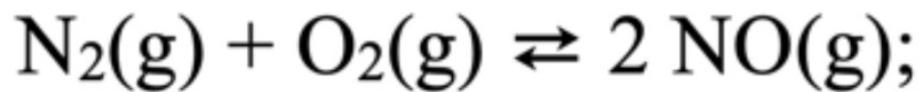
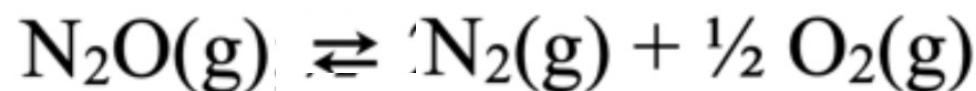
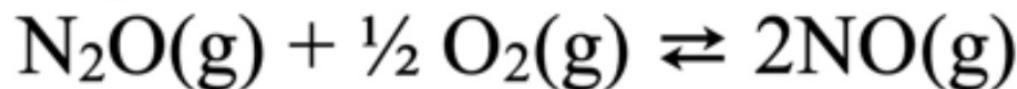
$$K_1 = 10$$

$$K_2 = \frac{1}{2}$$

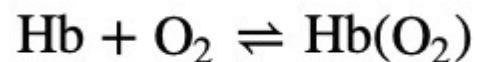
$$K_{total} = K_1 \cdot K_2 = 10 \cdot \frac{1}{2} = 5$$



Hvad er ligevægtskonstanten for



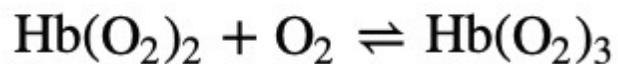
O_2 binder reversibelt til Hæmoglobin (Hb) i de røde blodlegemer



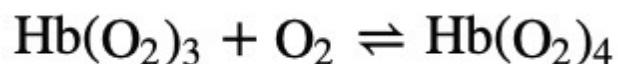
$$K_{c1} = 1.5 \times 10^4$$



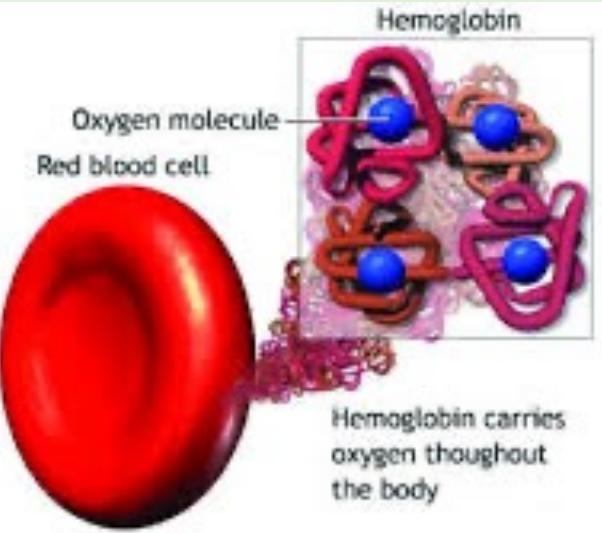
$$K_{c2} = 3.5 \times 10^4$$



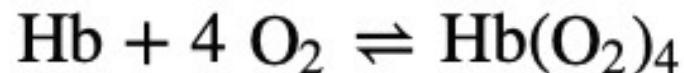
$$K_{c3} = 5.9 \times 10^4$$



$$K_{c4} = 1.7 \times 10^6$$



- Op til 4 O_2 binder reversibelt til Hæmoglobin (Hb). Hvad er trenden for bindingsstyrkerne udfra ligevægtskonstanterne?
- Hvordan beregnes ligevægtskonstanten for



sumreaktion af de 4 ligevægte;

$$K_{total} = K_{c1} \cdot K_{c2} \cdot K_{c3} \cdot K_{c4}$$

8.2 Ligevægte indstiller sig:

Ligevægtsforskydning

Omregning mellem ligevægtskonstant, start- og ligevægtskoncentration

Reaktionskvotienten Q beskriver hvilken vej reaktionen vil gå for at indstille ligevægt



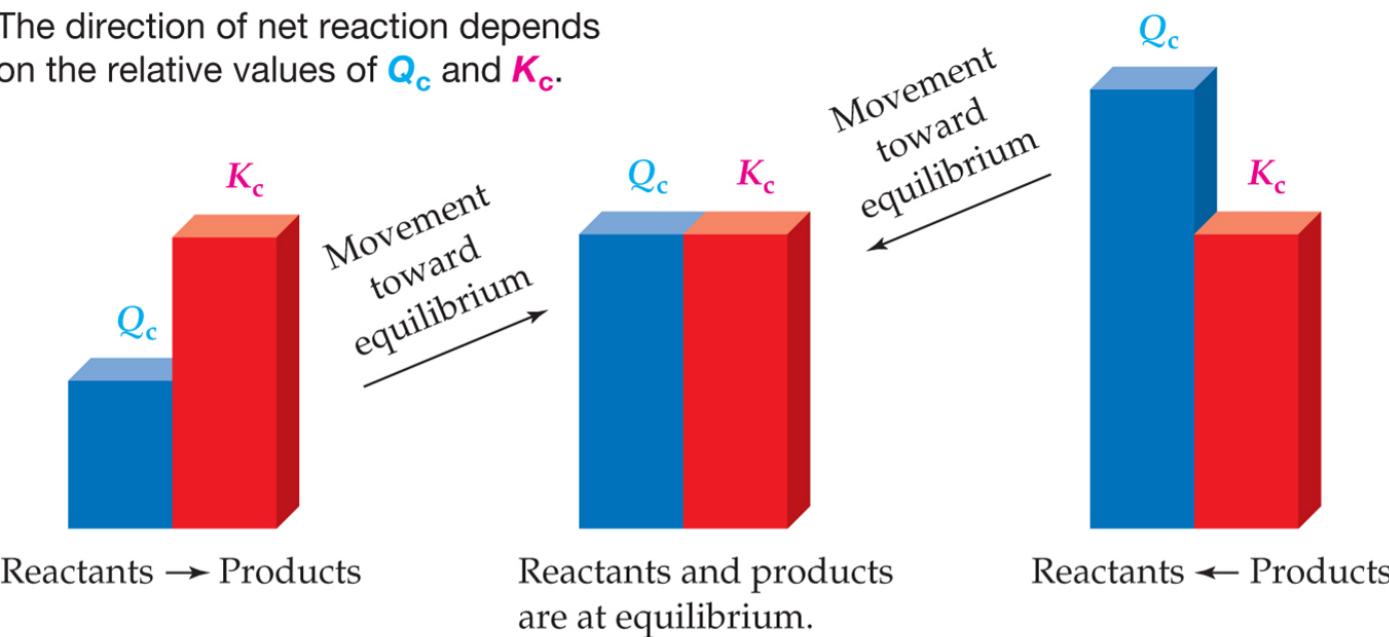
$$Q_c = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Hvis $Q < K$: reaktionen er spontan fra venstre til højre

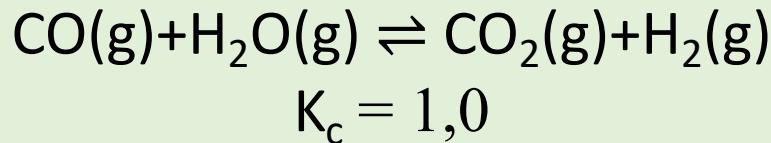
Hvis $Q = K$: reaktionen er i ligevægt

Hvis $Q > K$: reaktionen er spontan i den omvendte retning

The direction of net reaction depends on the relative values of Q_c and K_c .

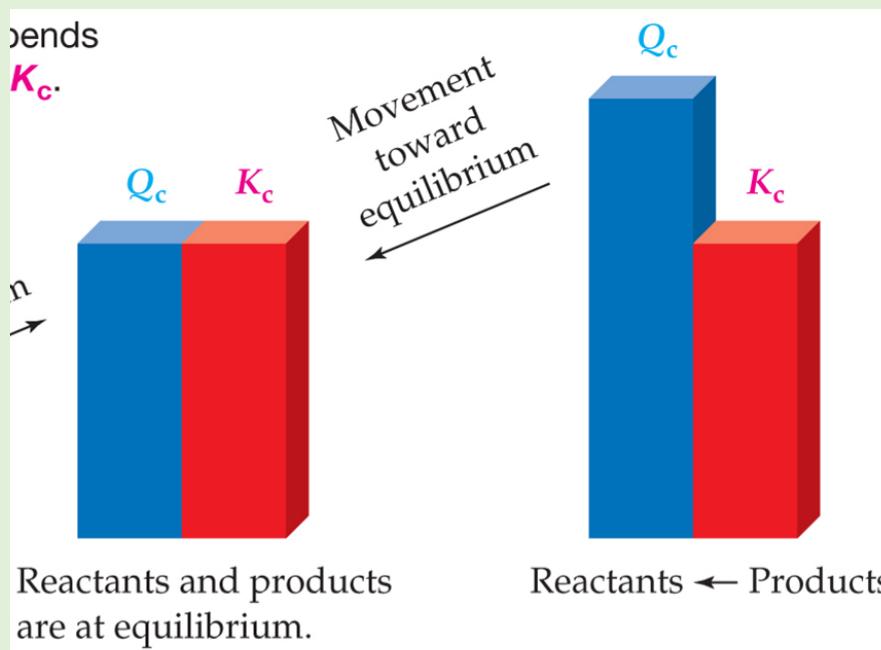


Hvilken vej vil reaktionen gå for at indstille ligevægt?



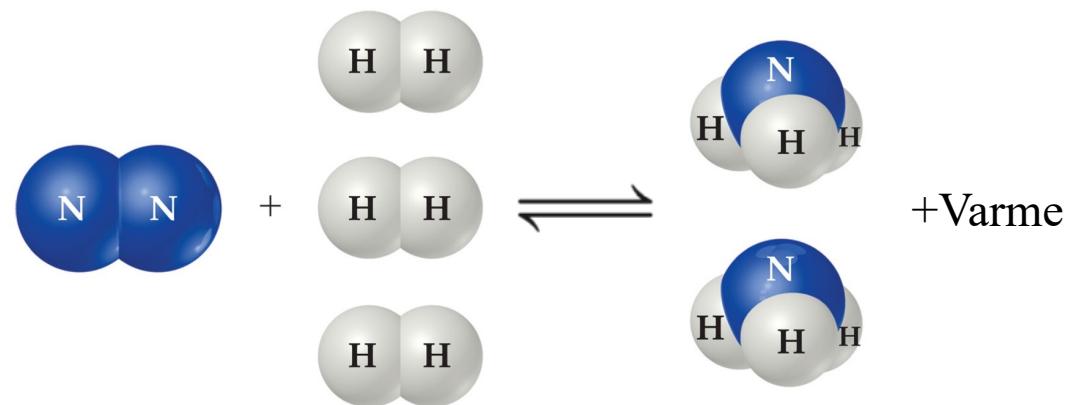
$[\text{H}_2\text{O(g)}] = 1,0 \text{ M}$, $[\text{CO(g)}] = 1,0 \text{ M}$
 $[\text{CO}_2\text{(g)}] = 2,0 \text{ M}$, $[\text{H}_2\text{(g)}] = 2,0 \text{ M}$

$$Q_c = \frac{[\text{CO}_2][\text{H}_2]}{[\text{CO}][\text{H}_2\text{O}]} = \frac{2 \cdot 2}{1 \cdot 1} = 4 > K_c$$

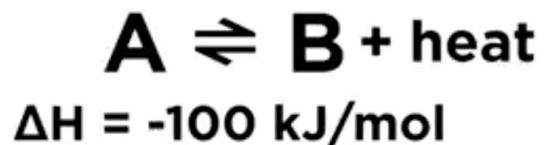


Ligevægte indstiller sig: Le Châtelier's princip

Hvis ligevægten forstyrres, vil en ny ligevægt der modvirker forstyrrelsen indstille sig.



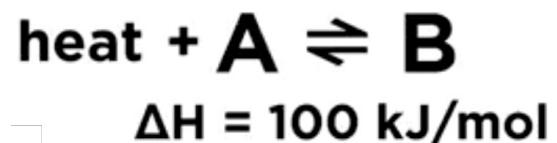
Høj temperatur favoriserer reaktionen der optager varme.



varme friges: **exoterm** reaktion ($\Delta H < 0 \text{ kJ/mol}$), højere temperatur fremmer reaktionen til venstre

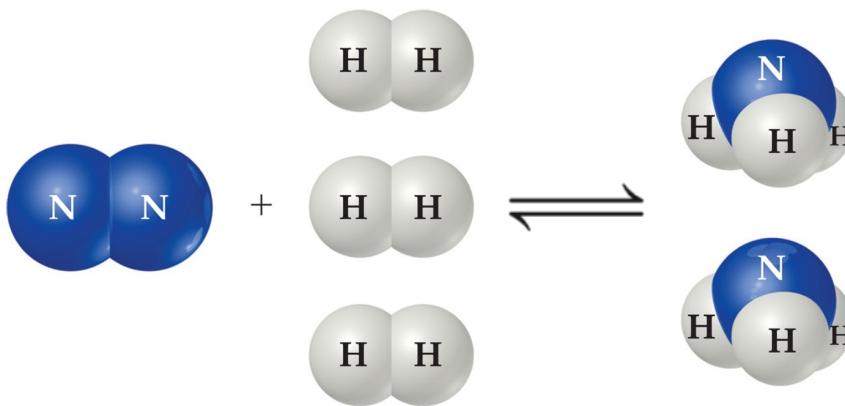
At tilføje stof, fremmer dets omdannelse.

Højere temperaturer fremmer reaktionen til højre side i en **endoterm** reaktion.



At tilføje A eller at fjerne B fremmer reaktionen til højre side.

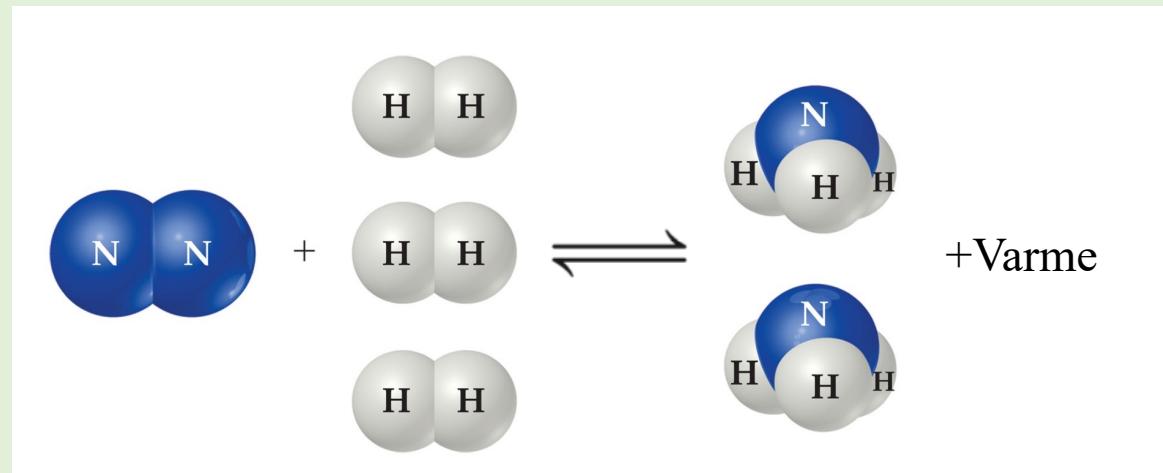
Højt tryk / lavt volumen favoriserer siden med færrest gasmolekyler.



Fortynding favoriserer siden med flere op løste molekyler.



Eksempel Le Châtelier's princip



højere temperatur
lavere temperatur



højere tryk (lavere volumen)
højere volumen



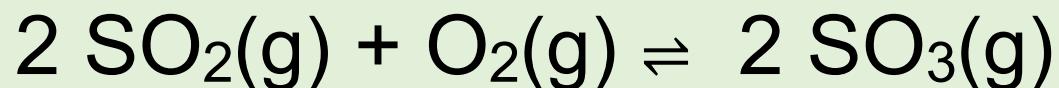
Færrest partikler
Flest partikler

[produkt] tilføjet
[reaktant] tilføjet, [produkt] fjernet

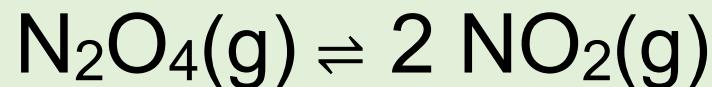


Eksempler

Hvordan skifter ligevægten ved højere tryk
(lavere volumen)?

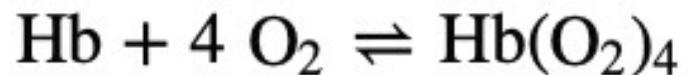


→ Færrest partikler



←

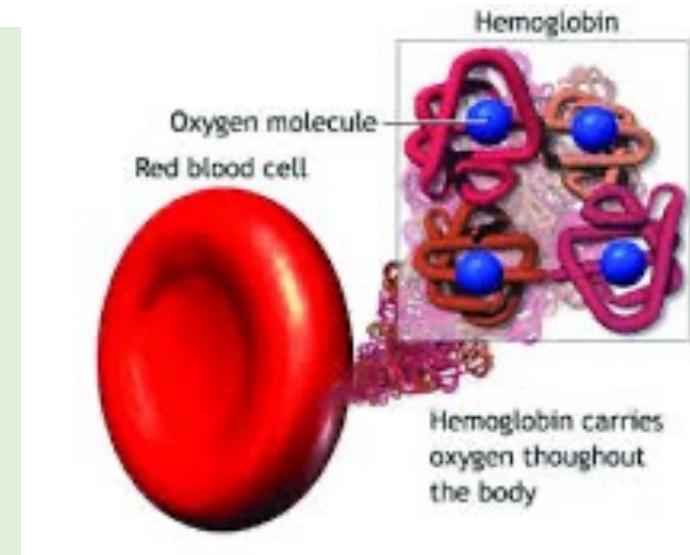
O_2 binder reversibelt til Hæmoglobin (Hb) i de røde blodlegemer



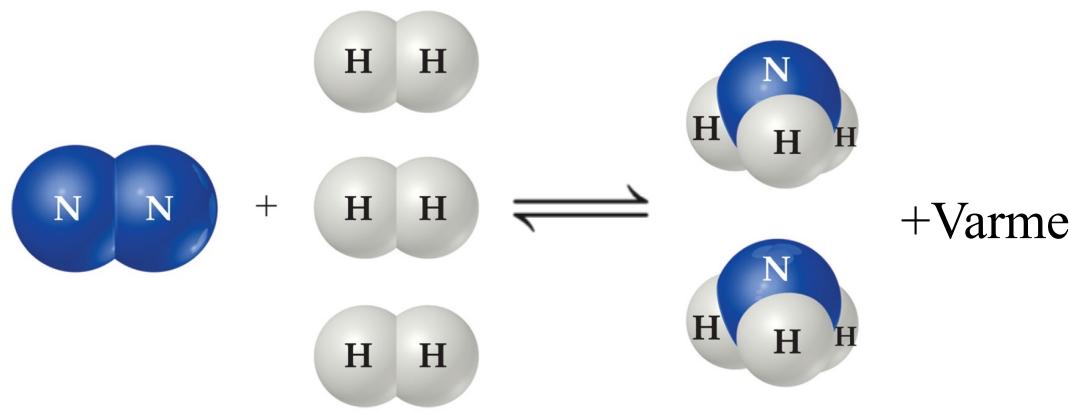
$$\Delta H = -200 \text{ kJ/mol}$$

Hvordan forskyldes ligevægten

- hvis der er meget O_2 (i lungerne)
- i væv hvor O_2 bliver forbrugt
- i muskelvæv hvor stofskifte øger temperaturen
- i bjergene hvor der er lavt P_{O_2}



Kemisk ligevægt i industrielle processer



Denne reaktion er exoterm og langsom ved lav temperatur.

- Øget temperatur øger hastigheden, men sænker udbyttet.
- Øget tryk vil favorisere produktdannelse.
- Lav temperatur, højt tryk og brug af katalysator er favoriseret.

Kvantitativ beregning: ICE er en systematisk metode til kvantitativ analyse af en afstemt ligevægt

- "Initial": startkoncentration (K_c) eller starttryk (K_p)
- "Change" står for forandring i koncentration eller partialtryk fra start til ligevægt
- "Equilibrium" = "initial" + "change"; disse værdier indgår i beregning af ligevægtskonstanten

Faste (s) og flydende (l) stoffer indgår ikke

Change:

- *husk de støkiometriske koefficienter;*
- *venstre og højre side vil have omvendte tegn*

A. Beregning af K_c

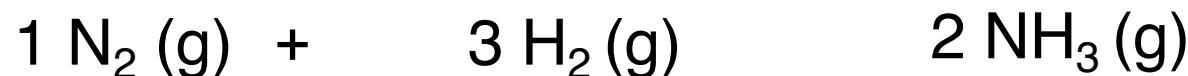
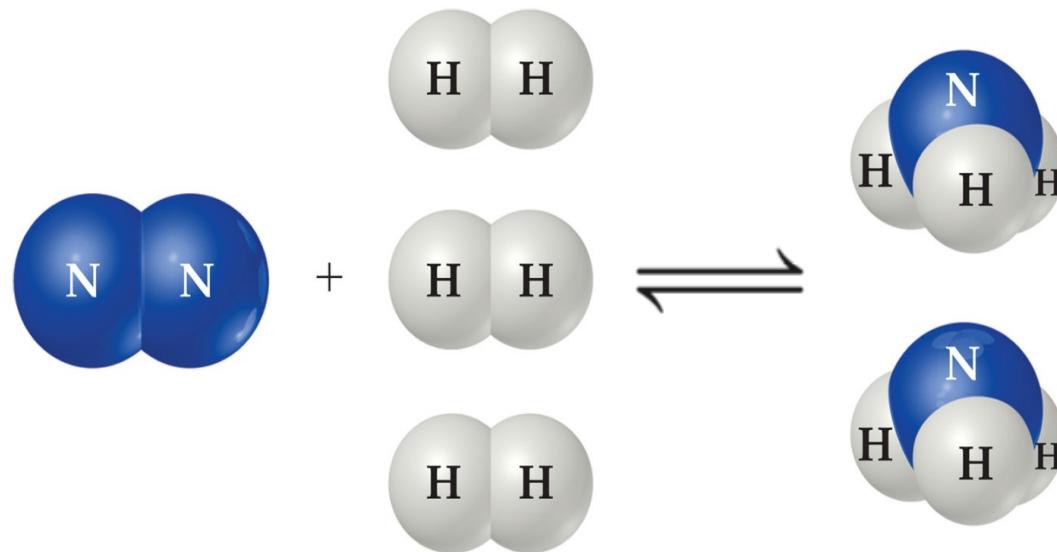
1 mol H_2 (g) og 1 mol I_2 (g) reagerer til ligevægt med HI i en 10 liter beholder.

Ligevægten indeholder 1 mol HI . Hvad er K_c ?

$\text{H}_2 \text{(g)} + \text{I}_2 \text{(g)} \rightleftharpoons 2 \text{HI} \text{(g)}$			
I, M	0,1	0,1	0
C, M	-0,05	-0,05	+0,1 (=2*0,05)
E, M	0,05	0,05	0,1

Beregning af K_p :

Reaktionskoefficienter kan læses som tryk for reaktioner i gasfase

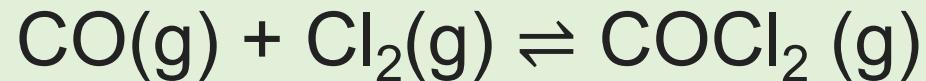


1 bar

3 bar

2 bar

Eksempel: Beregning af K_p med partialtryk



$3,00 \times 10^{-2}$ mol ren fosgen (COCl_2) placeres i en 1,50 L beholder og varmes til $T = 800$ K (antag at fosgen forholder sig som idealgas):

$$P_{\text{COCl}_2} = 1,33 \text{ bar (idealgasligning)}$$

Ved ligevægten finder man at det partielle tryk af CO er

$$P_{\text{CO}} = 0,503 \text{ bar.}$$

Beregn ligevægtskonstanten K_P .

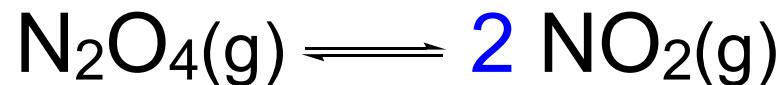
B. Beregning af ligevægtskoncentrationer (fra startkoncentration og ligevægtskonstant)

Ligevægtsreaktionen



har en ligevægtskonstant $K_c = 5,0 \cdot 10^{-3}$ ved 298 K. 1 mol N_2O_4 føjes til en 10 L beholder og ligevægten indstiller sig. Hvad er koncentrationerne for $[\text{NO}_2]$ og $[\text{N}_2\text{O}_4]$ ved ligevægt?

Ligning:



Initial [], M	0,1	0
Change [], M	-x	+2·x
Equilibrium [], M	(0,1 - x)	2·x

$$K_c = \frac{[\text{NO}_2]_{eq}^2}{[\text{N}_2\text{O}_4]_{eq}} = \frac{(2x)^2}{(0,1-x)} = 5,0 \cdot 10^{-3}$$

Løs for "x" og brug "x" til beregning af ligevægtskoncentrationer:
her er $[\text{N}_2\text{O}_4]_{eq}=0,1-x$; $[\text{NO}_2]_{eq}=2 \cdot x$

8.3 Brønsted syrer & baser: Ligevægte og syrestyrke samt pH

$$\log_{10}x = x$$

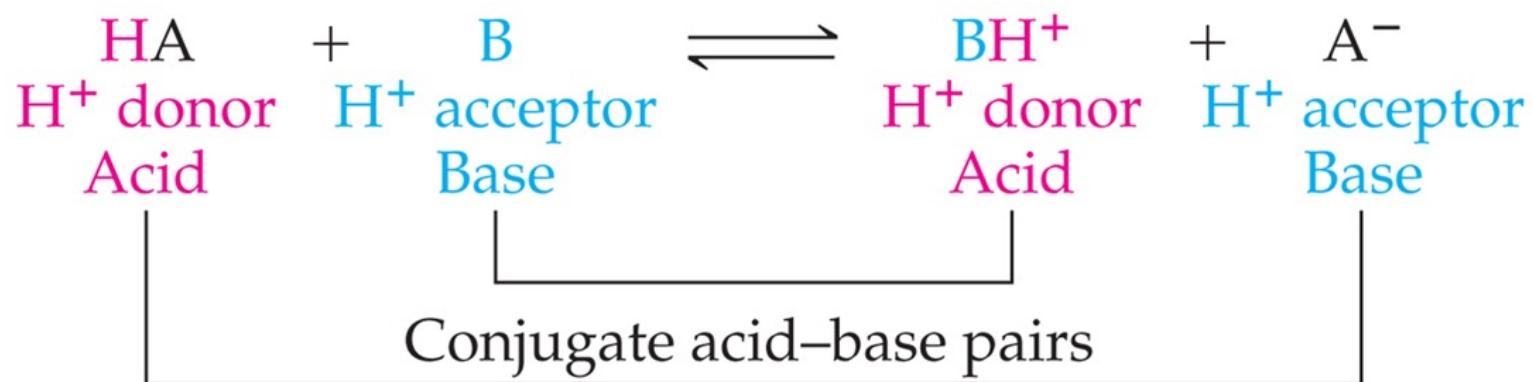
$$\log 1 = 0$$

I Maple `log10()`

Syre-base koncepter: Brønsted–Lowry Teori

Brønsted-Lowry Syre: Et stof, der kan overføre H^+ , dvs en protondonor

Brønsted-Lowry Base: Et stof, der kan acceptere H^+ , dvs en protonacceptor



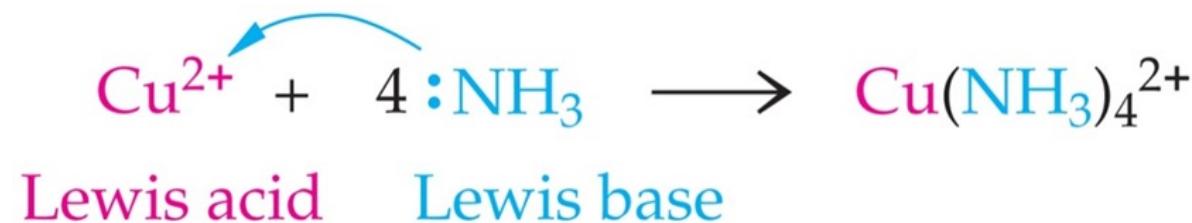
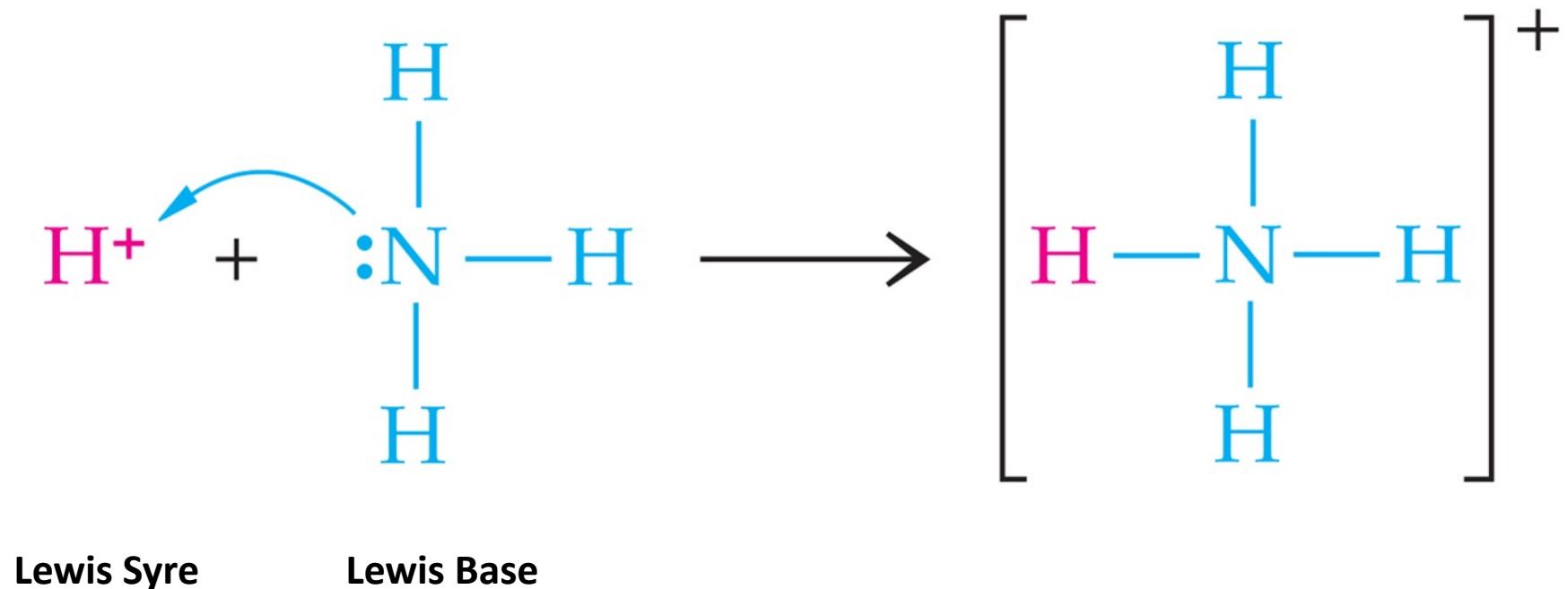
Konjugeret syre-basepar:

Kemiske formler der kun adskiller sig i en H^+

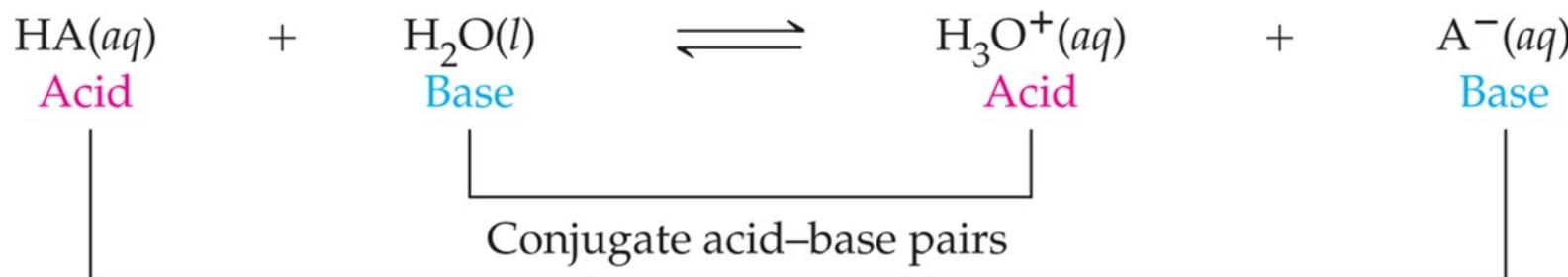
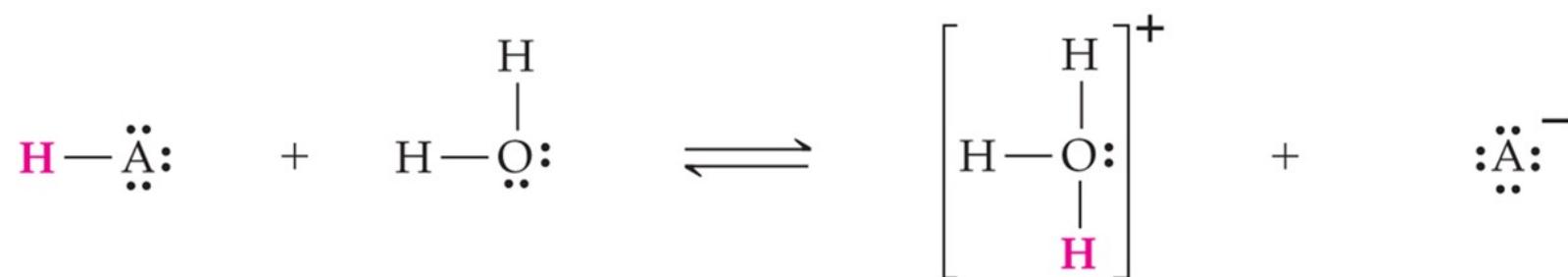
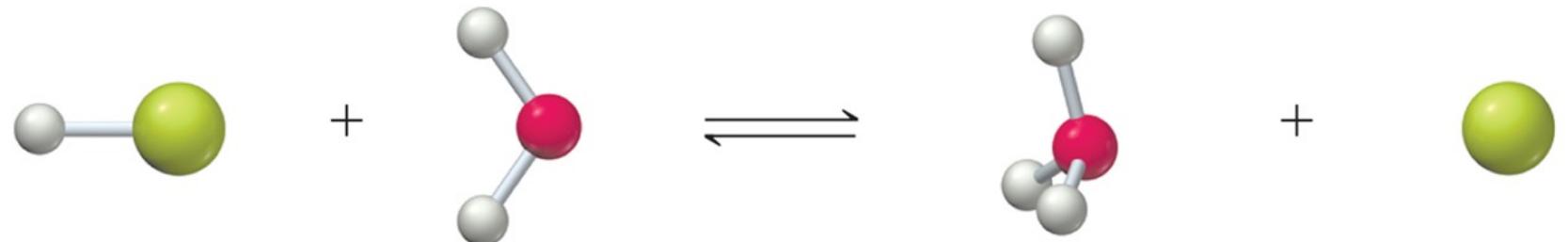
Lewis syrer og baser

Lewis Syre: elektron-par acceptor

Lewis Base: elektron-par donor



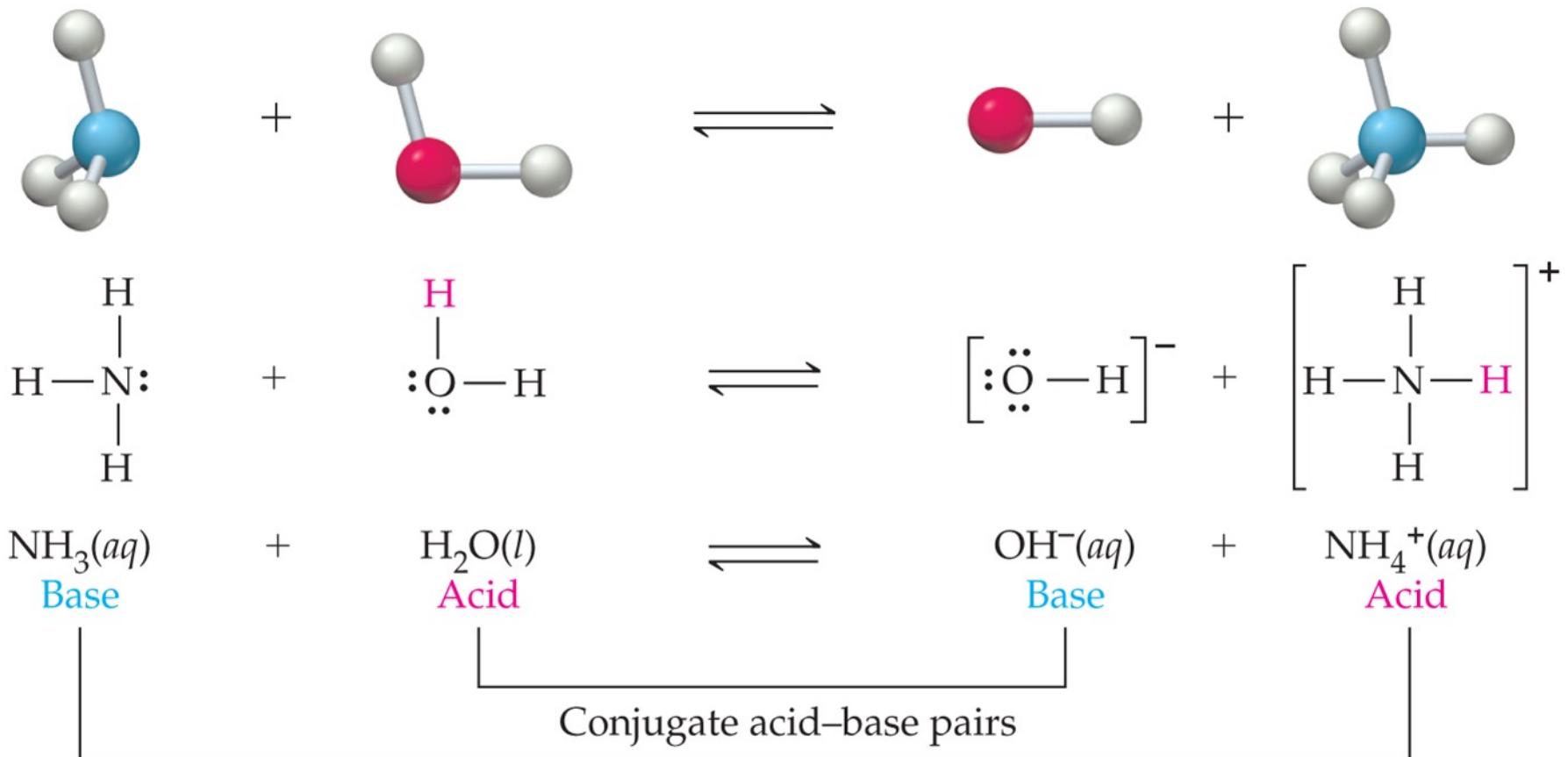
Dissociationsligevægt for en Brønsted syre



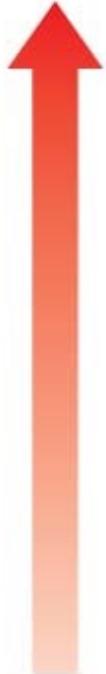
H_3O^+ Hydronium

Opskriv ligevægtskonstanten; husk (s) og (l) indgår ikke

Dissociationsligevægt for en Brønsted base:

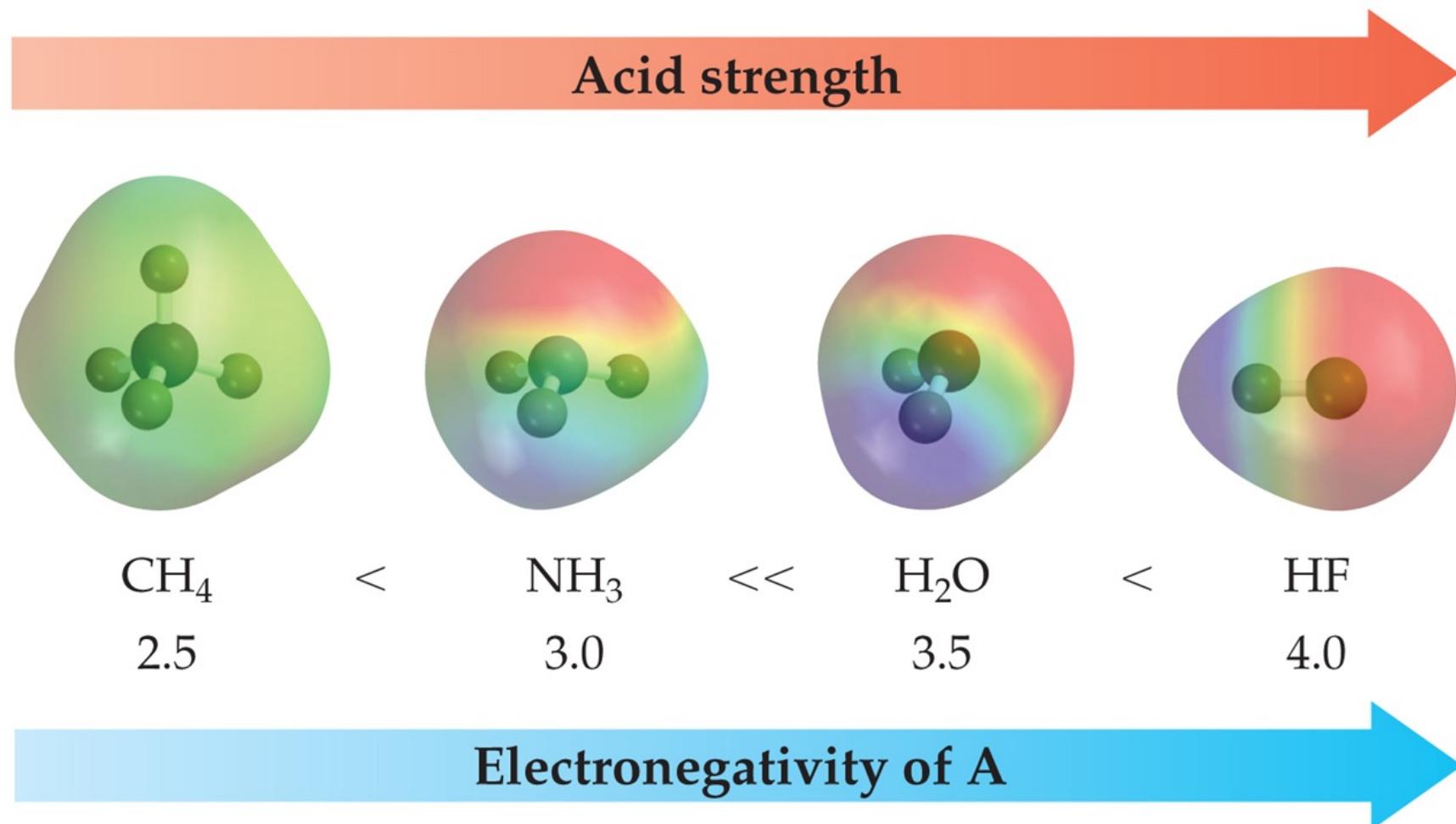


Syre og base styrke er antikorreleret i et konjugeret syre-basepar

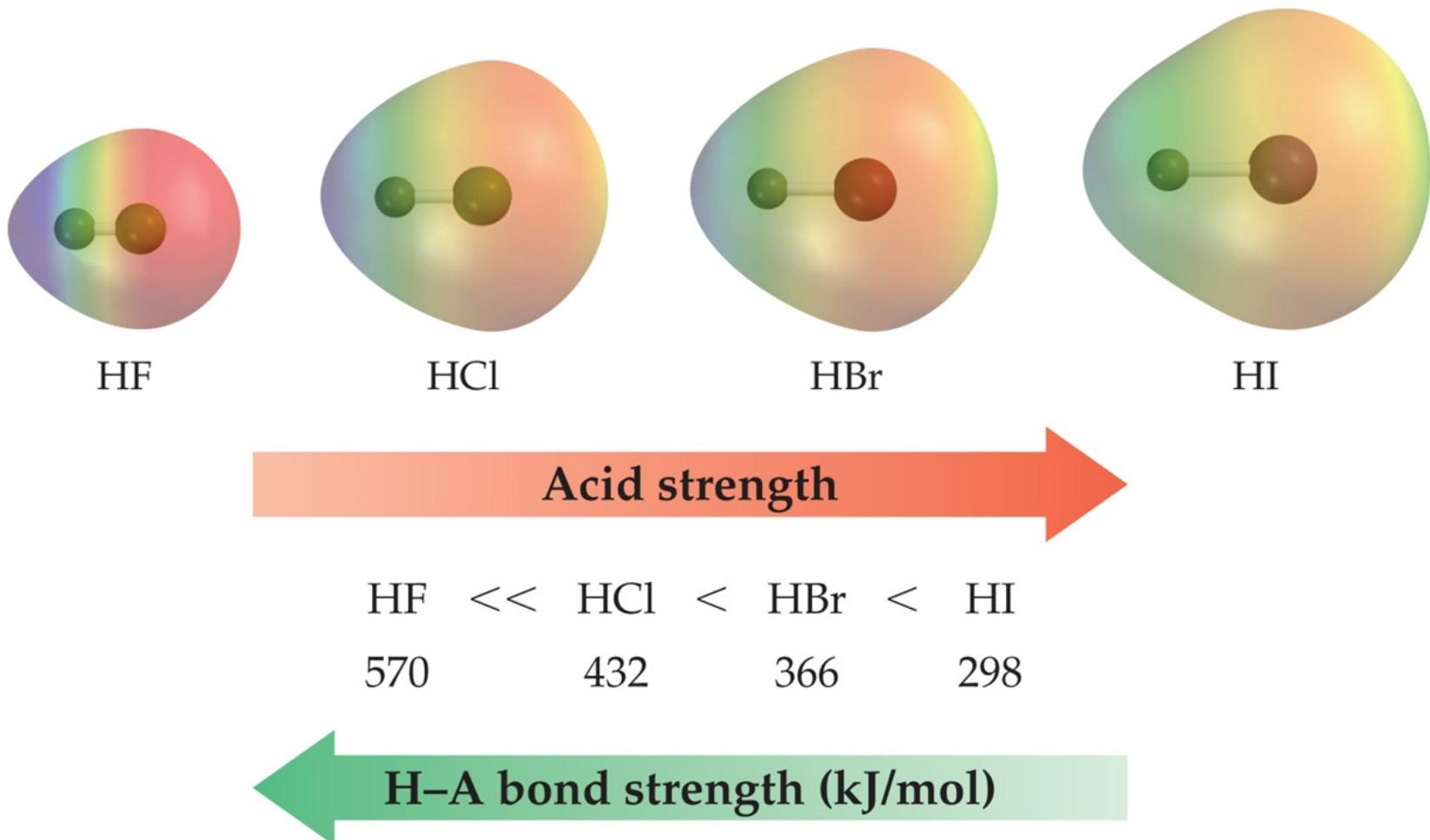
	Acid, HA	Base, A ⁻	
Stronger acid 	HClO ₄ HCl H ₂ SO ₄ HNO ₃ H ₃ O ⁺ HSO ₄ ⁻ H ₃ PO ₄ HNO ₂ HF CH ₃ CO ₂ H H ₂ CO ₃ H ₂ S NH ₄ ⁺ HCN HCO ₃ ⁻ H ₂ O NH ₃ OH ⁻ H ₂	Strong acids: 100% dissociated in aqueous solution. Weak acids: Exist in solution as a mixture of HA, A ⁻ , and H ₃ O ⁺ . Very weak acids: Negligible tendency to dissociate.	ClO ₄ ⁻ Cl ⁻ HSO ₄ ⁻ NO ₃ ⁻ H ₂ O SO ₄ ²⁻ H ₂ PO ₄ ⁻ NO ₂ ⁻ F ⁻ CH ₃ CO ₂ ⁻ HCO ₃ ⁻ HS ⁻ NH ₃ CN ⁻ CO ₃ ²⁻ OH ⁻ NH ₂ ⁻ O ²⁻ H ⁻
Weaker acid 		Very weak bases: Negligible tendency to be protonated in aqueous solution. Weak bases: Moderate tendency to be protonated in aqueous solution. Strong bases: 100% protonated in aqueous solution.	Stronger base

Svag syre: En syre, der kun delvist dissocierer i vand og derfor er en svag elektrolyt

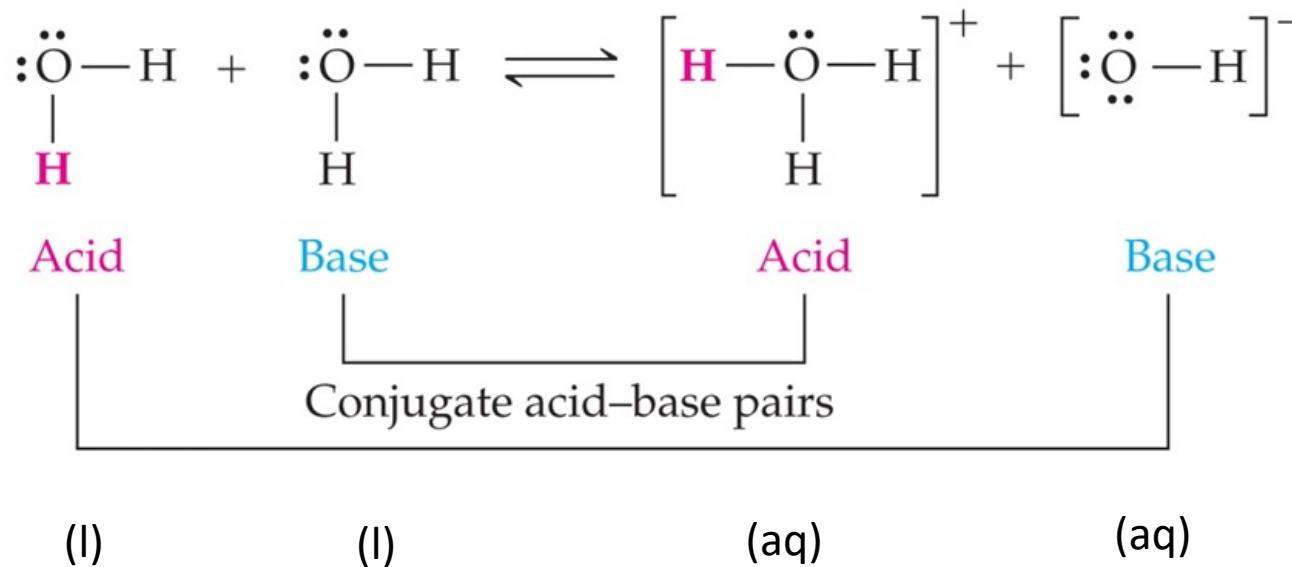
Faktorer, der påvirker syrestyrke: i samme periode er bindingspolaritet afgørende



Faktorer, der påvirker syrestyrke: i samme gruppe er bindingsstyrke afgørende



Vands “autodissociation” og tilhørende ligevægtskonstant



$$\text{Vands ionprodukt } K_w = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-]$$

Ved 25 °C i ren, neutral vand:

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] = 1.0 \times 10^{-7} \text{ M}$$

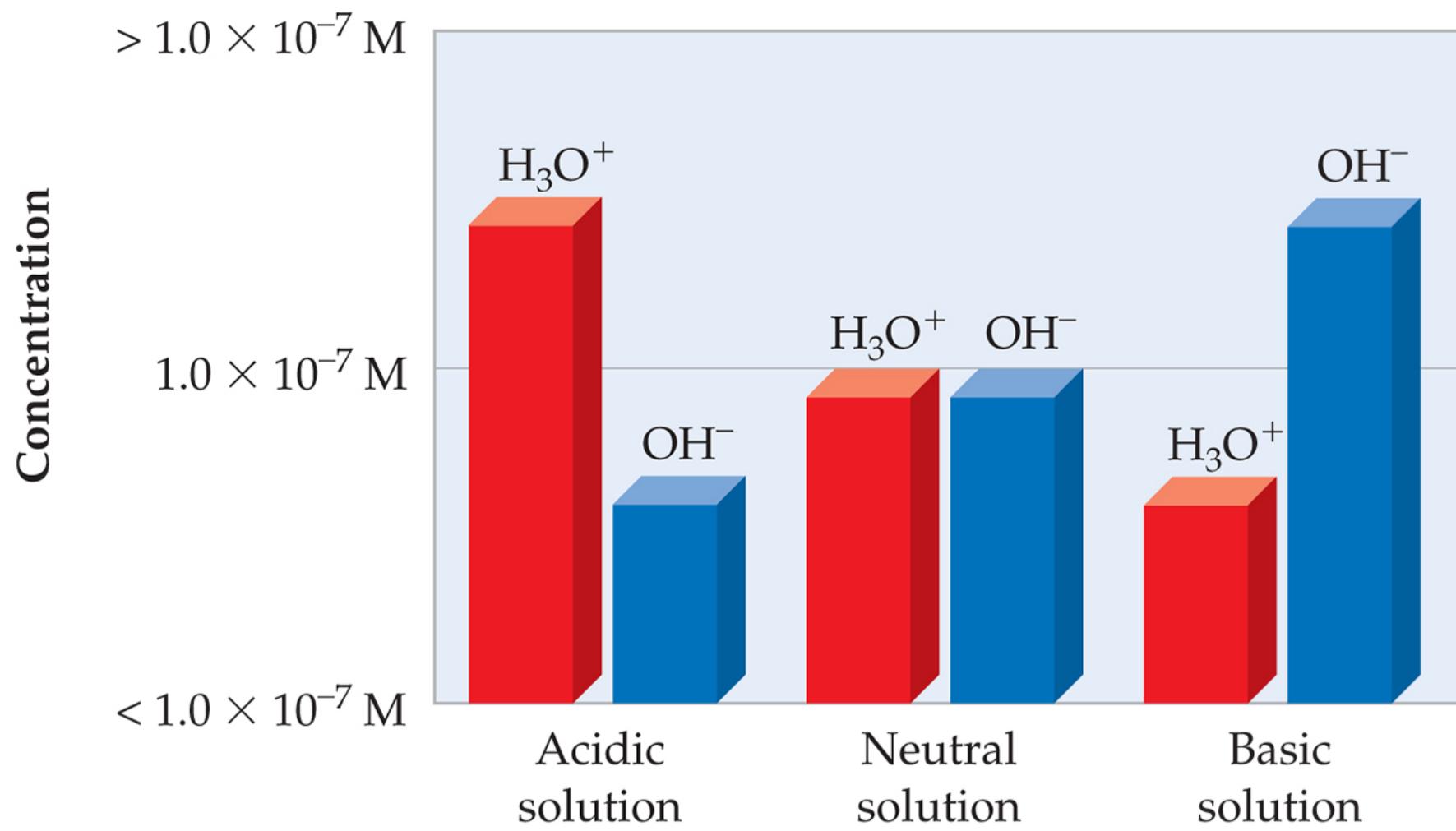
$$K_w = (1.0 \times 10^{-7})(1.0 \times 10^{-7}) = 1.0 \times 10^{-14}$$

$$K_w = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-] = 1.0 \times 10^{-14}$$

gælder også hvis $[\text{H}_3\text{O}^+]$ ikke er identisk med $[\text{OH}^-]$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = \frac{1.0 \times 10^{-14}}{[\text{OH}^-]}$$

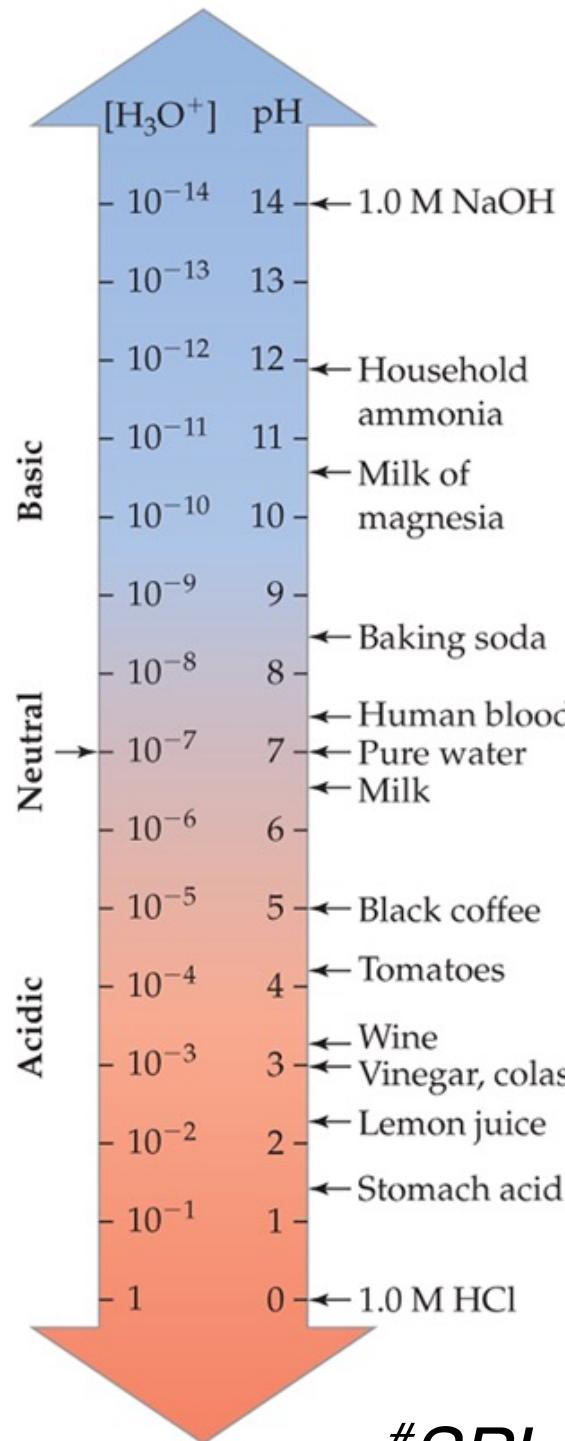
$$[\text{OH}^-] = \frac{1.0 \times 10^{-14}}{[\text{H}_3\text{O}^+]}$$



$$[\text{H}_3\text{O}^+] > [\text{OH}^-]$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] < [\text{OH}^-]$$

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



pH skalaen

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

$$[H_3O^+] = 10^{-pH}$$

sur: $pH < 7$

neutral: $pH = 7$

basisk: $pH > 7$

Hvis $[\text{OH}^-] = 10^{-8} \text{ M}$, så er $\text{pH} = \dots$?

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = \frac{1.0 \times 10^{-14}}{[\text{OH}^-]} = 10^{-6}$$

$$\text{pH} = -\log[\text{H}_3\text{O}^+] = 6$$