

# FYSIKALISK KEMI

22 Januari

## Intermolekylära & interjoniska krafter.

Intermolekylära : Växelverkar mellan oladade atomer / molekyler

Interjonisk : växelverkar jon-jon , jon-oladdad molekyl

## Allmänna begrepp.

Elektronegativitet : Förmåga hos atomen att dra till sig elektroner. förkortas EN

Högst hos Flour : 4,0

Lägst hos Francium : 0,7

Elektronaffinitet : Förmåga att ta upp elektroner  $A + e^- \rightarrow A^-$   
forkortas EA

Joniseringsenergi : Förmåga att avge elektroner  $A \rightarrow A^+ + e^-$   
forkortas IP (ionization potential)

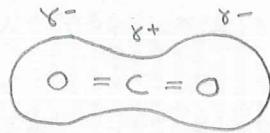
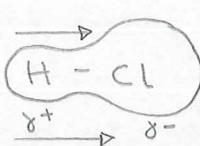
$$\text{EN} \sim \text{EA} + \text{IP}$$

Slutsats : EN är högst för atomen som vill bilda anjoner (F, Cl, Br, I, O ... osv.)  
lägst om atomen vill bilda katjoner (Na, K, Ca ... osv.)

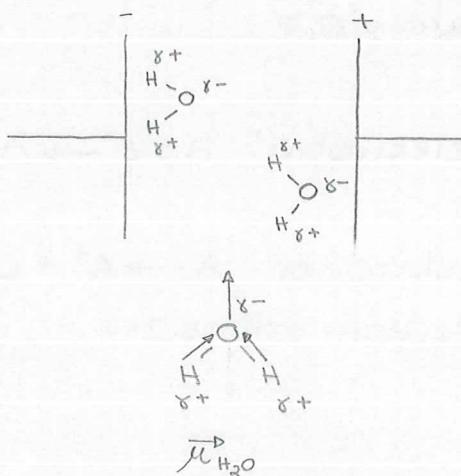
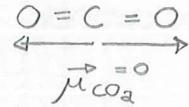
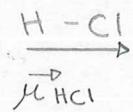
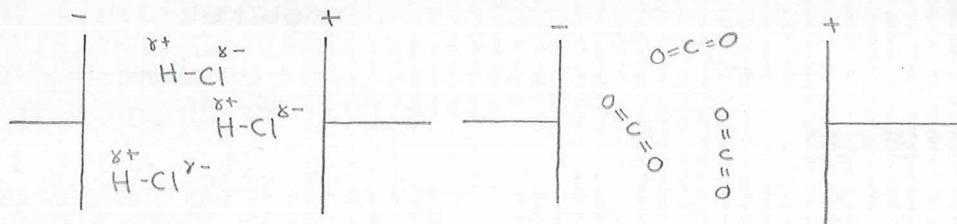
lären  
kärrer

## POLÄR BINDNING

Elektronförflyttning i bindningen! kolla EN!

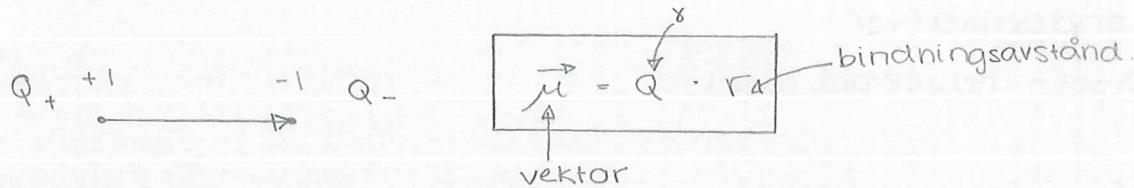


Polär molekyl: molekyl med en positiv och negativ ände.  
orienterar sig i ett elektriskt fält.



## DIPOLMOMENT - DIPOLER

Dipol: en positiv laddning som befinner sig intill en lika stor negativ laddning.



Dipolmoment:  $\vec{\mu}$ : vektor har både riktning och storlek  
(mätsätt)

Polarisera: Förskjuta elektroner hos atom/jon.

Polariseringsförmåga: Förmåga att polarisera.

## INTERMOLEKYLÄRA KRAFTER

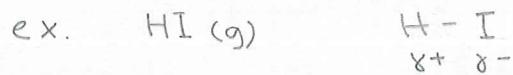
- Dipol - Dipol bindning
- Vätebindning
- Londonkrafter
- Dipol - Inducerad dipol.

Dipol - Dipol : ( $\sim 0,5 \text{ kJ/mol}$ ) OBS! Kemisk bindning

$> 100 \text{ kJ/mol} < 1000 \text{ kJ/mol}$

$$(\sim \frac{1}{r^6})$$

Detta gäller bara polära molekyler.



Vätebindning : (special fall av Dipol-Dipol) ( $\sim 20 \text{ kJ/mol}$ )

$$(\frac{1}{r^6})$$

gäller när väte binds till F, O, N. (nog EN)

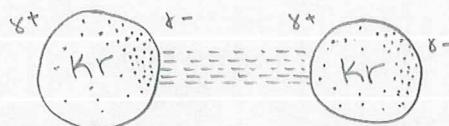
ex).  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HF}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ .

Hydrid = samlingsnamn för molekyler som innehåller väte.

25 Januari

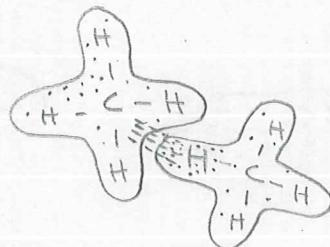
Londonkrafter / Dispensionskraft / Van der waals /  
Inducerad dipol - Inducerad dipol

ex.)

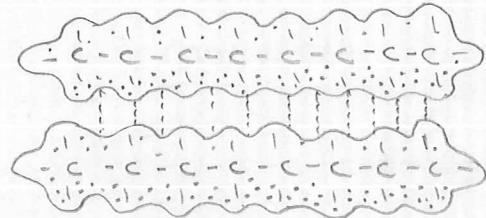


Regel: Ju fler elektroner desto starkare Londonkraft.

ex)



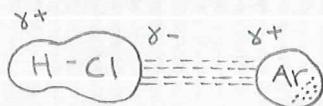
svag kraft  
(få väten)



stark kraft  
(många väten)

Dipol - Inducerad dipol ( $\sim$  några kJ/mol) ( $\sim \frac{1}{r^6}$ )

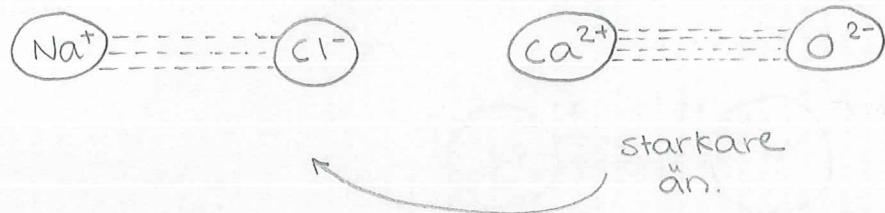
gasfas HCl & Ar



Interjoniska krafter energi  $\sim \frac{1}{r}$  (lång distans verkan)

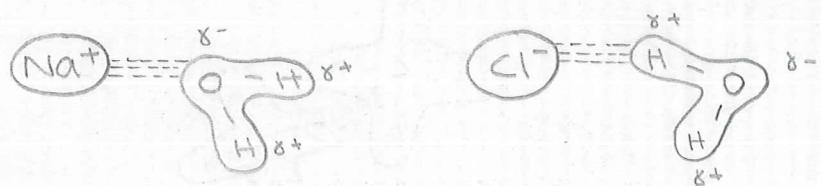
- Jon-Jon växelverkan ( $\sim 200-300 \text{ kJ/mol}$ )

ex)



- Jon-Dipol energi  $\sim \frac{1}{r^2}$  ( $\sim 15 \text{ kJ/mol}$ )

ex)  $\text{NaCl}$  (aq)



Slutsatsen:

- Kok-, småtpunkter och ångtryck kan förutsättas utifrån växelverkan mellan partiklar (atom, molekyl, jon)
- Vätebindning är en mycket stark växelverkan
- Ju flera elektroner desto starkare Londonkrafter
- Jon-Jon växelverkan är rent elektrostatisk och mycket stark

29 Januari

VERKLIGA GASER

Koefficienter som beror  
på vilken gas det är.

$$\text{Virialtilståndsekvationen: } P \cdot V_m = RT \left( 1 + \frac{B}{V_m} + \frac{C}{V_m^2} + \dots \right)$$

$$\begin{pmatrix} PV = nRT \\ V_m = \frac{V}{n} \end{pmatrix}$$

om idealt  $\frac{B}{V_m}$  och  $\frac{C}{V_m^2}$  Försummas!  $\Rightarrow PV_m = RT$

KOMPRESSIONSEFAKTOREN Z

Är gasen ideal eller icke-ideal?

$$Z = \frac{P \cdot V_m}{m^3/mol \cdot (RT)}$$

alltid samma

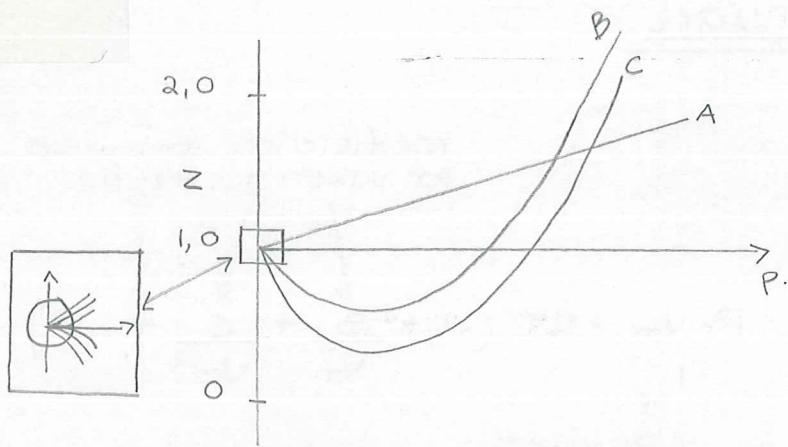
ideal Z = 1.

- Z > 1 = icke-ideal. Z < 1 = icke-ideal.
- $V_m^{\text{exp}}$  större än ideal
  - $V_m^{\text{exp}}$  mindre än ideal

- Repulsion mellan gas-partiklar (elektronmolnen)  
"höga tryck."

- Attraktion mellan gas-partiklar (intermolekylära krafter)  
"låga tryck."

$T = \text{konstant}$



A. Ex. vis  $\text{H}_2$

- Lätt molekyl
- svaga intermolekylära krafter som förklarar att  $z > 1$

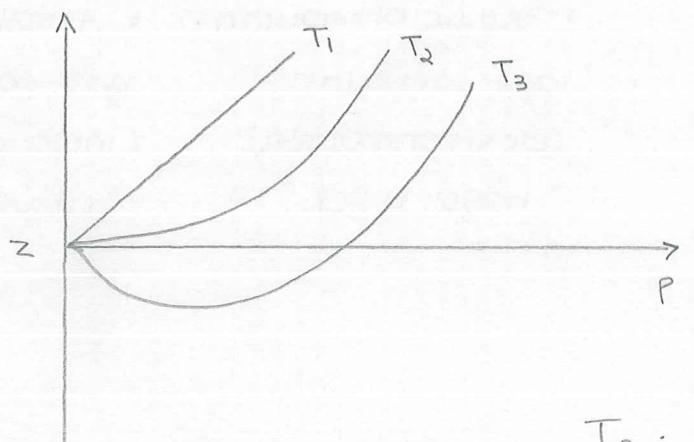
B. Ex. vis  $\text{CH}_4$

- Finns intermolekylära krafter som är relativt starka.

C. Ex. vis  $\text{C}_2\text{H}_6$

- —||—

"ÄMNE "A" I GASFAS"



$$T_1 > T_2 > T_3$$

$T_2$  : Boyletemperatur

$z = 1$  vid ett relativt stort tryck-intervall (idealga gaslagen funkar)

## Gasers egenskaper

Tryck: Kraft / Ytenhett,  $P = \frac{F}{A}$  ( $\frac{N}{m^2}$ ) Pa (pascal)  
(760 torr = 101,325 kPa)

## Gaslagar

Boyles lag:  $P \sim \frac{1}{V}$

Charles lag:  $P \sim T$

Avogadros lag:  $P \sim n$

$$P = \frac{Tn}{V}$$

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

prop. konst  
gaskonst. 8.314 (SI)

Ideala gaslagen:  $PV = nRT$

## Ideala gaslagen

Antagande: gaspartiklar växelverkar inte (inga intermolekylära krafter)  
gaspartiklarnas volym är försumbar i  
förhållande till kärlets volym.

## Molvolum

$$V_m = \frac{V}{n} = \frac{R \cdot T}{P} = \frac{8,314 \cdot 298 \text{ K}}{101,325 \text{ kPa}} = 0,02447 \text{ m}^3/\text{mol} \longrightarrow$$

$\longrightarrow 24,5 \text{ dm}^3/\text{mol}$

1 mol vid  $25^\circ\text{C}$  och  $101,325 \text{ kPa} \longrightarrow V = 24,5 \text{ dm}^3$

## Bestämma molmassa hos en gas

$$V_m = \frac{R \cdot T}{P}$$

$$M_{\text{gas}} = \cancel{s}_{\text{gas}} \cdot V_{m \text{ gas}}$$

## Gasblandningar

Partialtryck  
(Deltryck)

$$P_{\text{tot}} = P_A + P_B + P_C \dots P_n$$

(Daltons lag)

Molbråk :  $x$

$$\text{ex)} \quad x_A = \frac{n_A}{n_{\text{tot}}} = \dots$$

$$x_A + x_B + x_C + \dots = 1$$



ex)  $P_{\text{tot}} = 200 \text{ kPa}$  i en gas med A(g)  
och B(g).  $x_A = 0,30$   
Vad är  $P_A$  och  $P_B$ ?

$$P_A = 0,30 \cdot 200 \text{ kPa} = 60 \text{ kPa}$$

$$P_{\text{tot}} = P_A + P_B \rightarrow P_B = 200 - 60 \text{ kPa} = 140 \text{ kPa}$$

Alternativt:

$$x_A + x_B = 1 \rightarrow x_B = 0,70$$

$$P_B = 0,70 \cdot 200 \text{ kPa} = 140 \text{ kPa}$$

Molbråk x

$$x_A = \frac{n_A}{n_{\text{tot}}} = \frac{P_A}{P_{\text{tot}}} \quad (PV = nRT) \quad (P_A \sim n_A)$$

ex)  $P_A = 60 \text{ kPa}$        $P_B = 140 \text{ kPa}$

$$x_A = \frac{60 \text{ kPa}}{200 \text{ kPa}} = 0,30 \quad x_B = 0,70$$

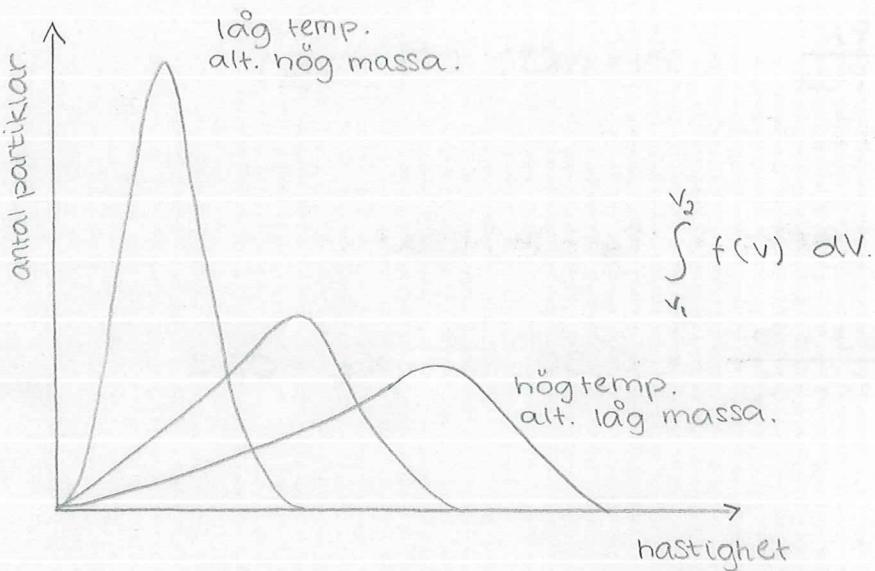
\*

## Kinetisk gasteori

### Tre antaganden

1. En gas består av partiklar med massan ( $m$ ) och diametern ( $d$ ) vilka rör sig slumpmässigt.
2. storleken ( $d$ ) är försumbar i förhållande till hur långt avstånd partikeln rör sig för att kollidera
3. Ingen växelverkan mellan partiklarna.

### Maxwell-Fördelning



$$f(v) = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2k_B T}$$

$$\rightarrow v_{\text{medel}} = \sqrt{\frac{8RT}{M}}$$

$v_{\text{medel}}$  = medelhastighet

$R$  = gaskonstant

$T$  = absolut temp.

$M$  = massan hos partiklarna.

(OBS! alla gaspartiklar har samma rörelsemängd)

$$\left. \begin{array}{l} p = mv \\ \text{---} \end{array} \right\}$$

$$KE = \frac{2}{3} R \cdot T = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2$$

↑  
rörelse energi

$\lambda$  = hur långt en partikel rör sig innan kollision med annan partikel. (fria medelväglängden)

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} (N/V) \pi d^2}$$

### Verkliga gaser (icke-ideal)

- förekommer intermolekylära krafter
- gaspartiklar upptar volym.

### van der waals gaslag

$$\underbrace{\left( P_{\text{obs}} + \frac{an^2}{v^2} \right)}_{\text{"P-idealt"}} \underbrace{\left( V_{\text{kärl}} - nb \right)}_{\text{"V-idealt"}} = nRT$$

"P-idealt"

"V-idealt"

b = volym hos partiklarna

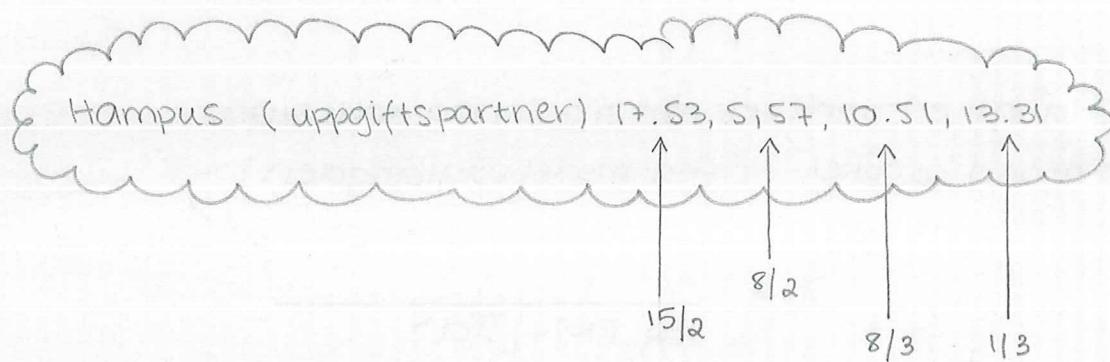
a = intermolekylär korrektion

v = attraktion, n = repulsion

a & b slås upp i tabell! unika för varje ämne.

## Joule-Thomson effekten

När en gas expanderar kyls den ner p.g.a. att intermolekylära växelverkningar bryts.



## Gasens kritiska punkter

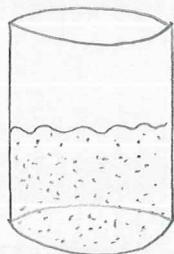
$T_c$  : kritisk temperatur

critical : om  $T_{gas} > T_c$  kan gasen inte kondenseras!



gas

$$P \approx 0,94$$



vätska

$$P_A = 0,96$$

gassen kallas "superkritisk vätska". (överkritisk vätska)

$$PV = nRT$$

$P_c$  : kritisk tryck

$V_c$  : -"-" volym

$V_{mc}$  : -"-" molvolym

$$P_c V_c = nRT_c$$

## VÄTSKOR

Viskositet : Flödesegenskap

Hög viskositet  $\longrightarrow$  trögflytande  
Beror på intermolekylära krafter

ex)  $H_3PO_4$ , olja (matolja)

$H_2SO_4$

$HCl$

vid normalt  
tryck & temp.

$HCl(g)$

$H_2SO_4(l)$  Lite trögflytande (vätebindningar)

$H_3PO_4$  "lite fast", som kokosfett.

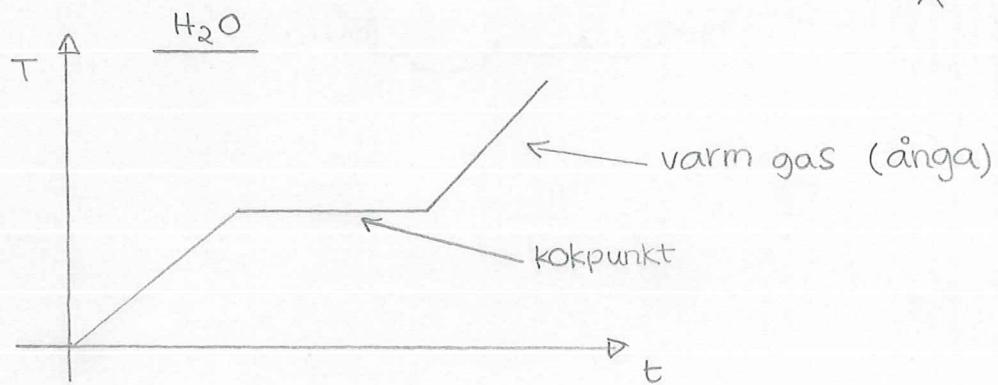
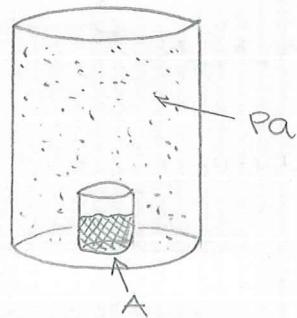
## VÄTSKORS ÅNGTRYCK & KOKPUNKTER

Ångtryck: ånga och vätska är i dynamisk jämvikt

- ångtrycket ökar med temp.
- ångtryck = omgivande tryck

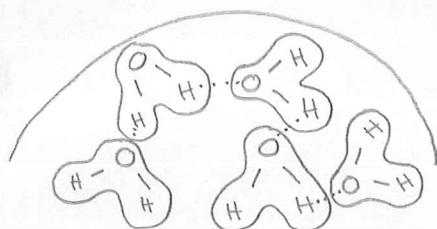
ex)  $P = 101,325 \text{ kPa} =$

$\Rightarrow T_{\text{kokpunkt}}$



Kökpunkter & ångtryck påverkas av de intermolekylära krafterna.

### YTPÄNNING



Def. Mått på den kraft som ytmolekyler måste utsättas för så att de känner samma kraft som inuti vätskan.  
Ökar generellt med styrkan hos de intermolekylära krafterna.

### YTPÄNNING, γ

$$dW = \gamma \cdot d\sigma$$

ändering i arbete (N·m)

ändering i ytan. ( $m^2$ )

$$\gamma = \frac{dW}{d\sigma} \left( \frac{\Delta W}{\Delta \sigma} \right)$$



Vi vet att:  $W = F \cdot s$

(Arbete = kraft · sträcka)

$$\begin{pmatrix} W_{\text{start}} = 0 \\ W_{\text{slut}} = \Delta W \end{pmatrix}$$

$$\Delta W = F \cdot h$$

↑                   ↑  
från newtonmätaren.      höjden.

Arean vid start = 0

$$A_{\text{slut}} = l \cdot h \quad \textcircled{2} \quad \leftarrow \text{Fram och baksida}$$

### KRÖKTA YTOR

Vätskor strävar efter att minimera sin ytarea.

→ sfärisk geometri

(Detta motverkas av gravitationen)

BUBBLA: Region där ånga (och även luft) omgärdas av en tunn vätskefilm. ex) såpbubbla.

HÅLIGHET: ångfyllt hål i en vätska ex) uppstår vid kokning.

DROPPE: liten vätskevolym som står i jämvikt med omgivningen.

AREOSOL: en definierad volym av partiklar ex) dimma.  
(nm → μm      partikel storlek)