

GAS , VÄTSKA  eller KRISTALLER  **

2/9

- Beror på krafter mellan molekyler:

- ▲ mellan joner
- ▲ mellan joner & molekyler
- ▲ mellan molekyler
- ▲ elektrostatiskt $E = \frac{\text{konst} \times q_1 \cdot q_2}{r^2}$

- Hitta EGENSKAPER i periodiska systemet

- ▲ elektronegativitet
 - ▲ storlek
 - ▲ laddning
- } laddningsfördelning

- 3D-geometri: HUR molekyler ser ut \Rightarrow kemisk bindning

- ▲ elektronparsbindning & Lewisstrukturer
- ▲ VSEPR (valence shell electron pair repulsion)
- ▲ hybridisering (sp^3 , sp^2)
- ▲ orbitaler \Rightarrow är molekylen stabil?

- Stabilitet beror på ENERGI ⚡

- ▲ bindningsenergi - jämför N_2 , O_2 , F_2
- ▲ reaktionsentalpi'er - endoterm eller exoterm reaktion?

- Reaktionshastighet: KINETIK (hastighetsekvationer)

- ▲ i biologiska system (enzymreaktioner)
- ▲ i ruddkollan
- ▲ i reaktorn
- ▲ i miljon

- Biologiskt system

- ▲ cellen & dess beståndsdelar
- ▲ molekylära komponenter
- ▲ proteiner & aminosyror
- ▲ DNA & RNA
- ▲ kopplade reaktioner

LABSÄKERHET


RISKER

2/9


- Mekaniska skador: skärskador

- Elektriska skador

- Brännskador

- Kemiska risker: eldskada 

frätskada 

förgiftning 

- Chock

⇒ UNDVIK PESSA:

• skär alltid bort slangar från glasutrustning (snitt i kanten)

• se till att allt glas är helt (⇒ risk för implosion)

• tänk på att **varm** och **kall** glasutrustning ser likadana ut

• vid brännskada: skölj i **ä n g e** med **LJUMMET** vatten.

KEMISKA RISKER

- Termodynamik: energiutveckling per massenhet?

- Kinetik: energigenerering snabb eller långsam?


- Orbitalteori & reaktionslära: reaktion med levande organismer?


REAKTIVITET 

⇒ 1) Hälsorisker: skador på organ osv. giftig, frätande, irriterande, cancerogen

2) Fysikaliska risker: brandfarlig, explosiv

3) Miljörisker: omedelbar eller fördröjd fara för miljön

 "Säkerhetsblad för kemikalier i kemihuset" finns på chestud. chalmers.
se/annat → kolla innan VARJE lab!

TIPS Betrakta ALLA kemikalier som giftiga,  och läs varningstexten!

MINSKA RISKERNA

- Var ALLTID i tid!
- Stressa inte.
- Var väl förberedd → gör allting mycket enklare.
- Använd ALLTID labrock och skyddsglasögon.
- Ha inte linser på labb → vanliga glasögon funkar oftast.

SE TILL ATT VETA PLATSEN FÖR

- Eldbekämpningsmaterial: brandfilt SLÄCKA uppifrån eller KOLLA nerifrån & upp
sand
brandsläckare: kolsyra, pulver & vatten
- Nöddusch
- Ögonsusch
- Första förband
- Telefon: slå 00112
- Nödutgångar (ur labbet, ut ur huset)
- B&R

DRAGSKÄP

- ♥ ska ALLTID användas.
- ♥ Var extra nogga med giftiga, explosiva och farliga kemikalier.

FRÄTSKADOR

* Starka syror och baser: hydroxid (OH^-), syra, ammoniak, brom

* VIKTIGT!

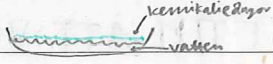
SIV-regeln: Syra i vatten

- * Rör om för att lösa NaOH - värm ALDRIG!
- * Pipettera ALDRIG med munnen!
- * Vid stänk i ögonen, skölj i å n g e med MYCKET vatten!

ELDFARLIGA & EXPLOSIVA ÄMNEN


- ☞ organiska lösningsmedel
- ☞ dietyleter kan bilda peroxider \Rightarrow explosivt!
- ☞ Na(s) och K(s) reagerar med vatten och bildar vätgas.
- ☞ Starka oxidationsmedel kan ge explosioner med brännbara och/eller oxiderande ämnen.

☞ ClO_3^- , ClO_4^- , MnO_4^- , NO_3^- , $-\text{O}-\text{O}-$ (peroxid) \Rightarrow se upp!

\Rightarrow vid eldsvårda: försök alltid att KVÄVA elden 

FLAMPUNKT: lägsta temperatur vid vilken ämnet antänds vid kontakt med öppen låga


TERMISK TÄNDPUNKT: tänder ämnets ångor

 Märk ALLTID behållare med INNEHÅLL, NAMN och DATUM.

AVFALL

- ☞ Organiska lösningsmedel i speciella dunkar \rightarrow halogenerat (klorerat)
- \rightarrow icke-halogenerat
- ☞ Tungmetaller för sig. Ex) As, Cr, Cd...
- ☞ Vassa föremål Ex) pipetter, kanylter
- ☞ Glaskross.
- ☞ Släng **INGENTING** i papperskorgarna!
- ☞ Torrslask: torra papper först i dragskåp, sen släng.


BRAND

- ☞ Kemikalie: — sand, CO_2 , lock, uryglas,  sand, CO_2
- ☞ Människa: ALDRIG CO_2 \rightarrow risk för förfrysningsskador
- ☞ Laboratoriet: pulver eller CO_2

TÄNK PÅ: skölj ALLTID med mycket vatten!!

Vid utrymning, återsamling på Kemigården.

DOKUMENTERING av LABORATION

- Använd samma anteckningsbok för ALLA labbar = LABJOURNAL
-  är en del av ens examination → skriv namn & program.
- Skriv tydliga rubriker
 - ♡ Uppgift och SYFTE } skriv NAMN!
 - ♡ Källor och referenser
 - ♡ MATERIAL: kemikalier, instrument, hjälpmedel
 - ♡ UTFÖRANDE: hur gjorde du? Glöm inte misstag!
 - ♡ RESULTAT i form av
 - ☑ Observationer, gärna med foto.
 - ☑ Mätvärden, gärna i en tabell.
 - ☑ Beräkningar, ekvationer med källor.
 - ♡ SLUTSATSER du drar från resultaten.

⇒ Efter vissa labbar ska det lämnas in en SKRIFTLIG RAPPORT som ska följa "Skrivarvisningarna" som finns på hemsidan.

Grönsakslabben ska

- 1) följa skrivervisningarna (tabell 1)
- 2) ha ett försättsblad
- 3) innehålla (minst) en ekvation (t.ex. definitionen av pH)
en figur (molekylstruktur eller uppställning)
en tabell (t.ex. färgutslag mot pH)
litteraturkälla (ange sidhänvisning)

6/9
ÖVNING

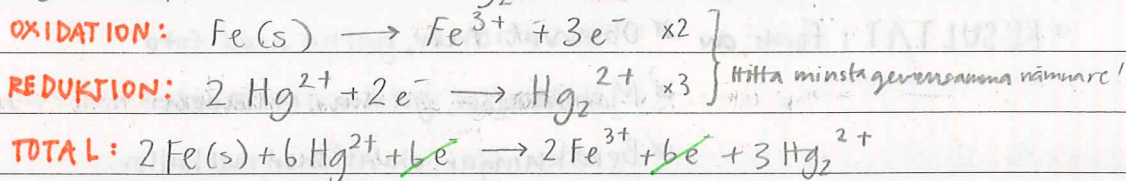
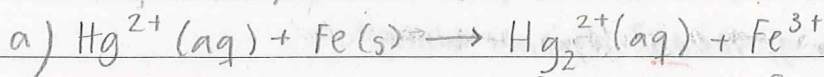
OXIDATIONSTAL - REGLER

1. rena grundämnen: $OT = 0$
2. summan av alla oxidationstal = laddningen.
3. H har $OT = +I$ OM INTE H är bundet till en metalljon (MH): $OT = -I$
4. Grupp 1 och grupp 2 har $OT = +I$ resp. $OT = +II$ (samma som jontalning)
5. Halogener $OT = -I$ om de inte är bundna till syre eller halogener med lägre atomnummer. F har ALLTID $OT = -I$.
6. O har $OT = -II$

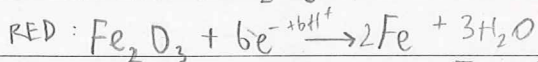
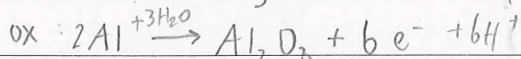
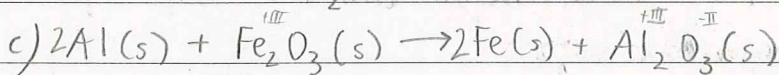
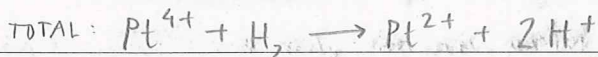
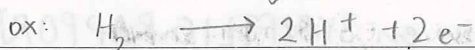
BALANSERA REDOXFORMLER

1. Balansera alla atomer utom O och H.
2. Balansera O och H med H^+ / H_2O för sur lösning eller H_2O / OH^- för basisk lösning. **ALDRIG** O_2 och H_2 för att balansera.
3. Balansera laddningen med e^- .

K2) Balansera följande redoxreaktioner

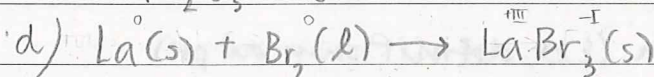


→ BRA för böjiga formler!



SKRIV UT

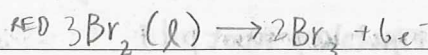
-(s), (l), (g)



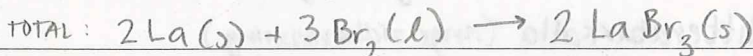
-(aq) för molekyler



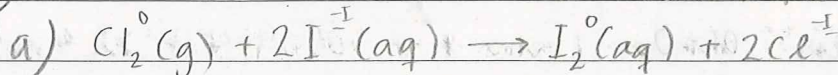
-(aq) kan utelämnas



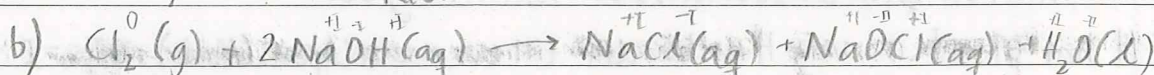
för joner.



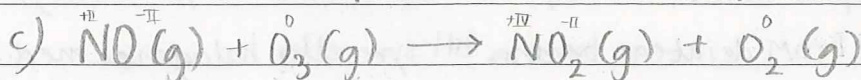
K10) Hitta vilket ämne som oxiderats och vilket som reduceras.



OX: jod RED: klor



⇒ DISPROPORTIONERING: samma atom både oxideras & reduceras.



OX: kväve RED: syre (1 syreatom ur ozonmolekylen)

GASER

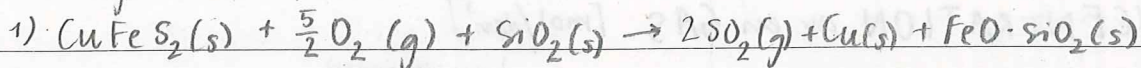
Kap 4

9/9

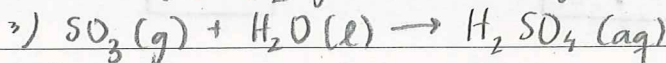
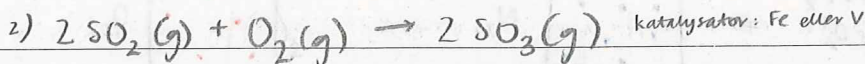
STÖKIOMETRI

Föreläsning Lars

Ex) Sverige står för 1% av världens kopparproduktion, ca 350 000 ton per år. Som råvara används främst kopparkis, CuFeS_2 . Av detta kan man göra svavelsyra. Hur mycket?



↳ approximativ nettoprocess



$$4) \frac{n_{\text{Cu}}}{1} = \frac{n_{\text{SO}_2}}{2} \rightarrow n(\text{H}_2\text{SO}_4) = n(\text{SO}_2) = 2n(\text{Cu}) \quad \text{dvs. 2 mol H}_2\text{SO}_4 \text{ från 1 mol CuFeS}_2$$

$$5) m(\text{H}_2\text{SO}_4) = 2n(\text{Cu}) \cdot M(\text{H}_2\text{SO}_4) = 2 \left(\frac{m(\text{Cu})}{M(\text{Cu})} \right) \cdot M(\text{H}_2\text{SO}_4) =$$

$$= 2 \cdot \frac{350 \cdot 10^3 \cdot 10^6}{63,5} \cdot 100 = 12 \cdot 10^6 \text{ g} \approx 1,2 \cdot 10^6 \text{ ton svavelsyra} \quad \left. \vphantom{\frac{350 \cdot 10^3 \cdot 10^6}{63,5}} \right\} \text{RIMLIGT}$$

↳ Arzproduktionen i Sverige (2010) var ca $0,7 \cdot 10^6$ ton per år

⇒ svar: Kan tillverka $1,2 \cdot 10^6$ ton per år

→ H_2SO_4 används till bl a konstgödsel

MILJÖ: förr släpptes SO_2 ut i luften, nu görs den om till SO_3 och görs om till H_2SO_4 man kan sälja.

RÄKNA PÅ GASER

Allmänna gaslagen: $pV = nRT$, p = tryck (Pa), V = volym (m^3), T = temp. (K)
 n = substansmängd (mol), R = gaskonstanten

- Gaskonstanten: $R = \frac{pV}{n \cdot T} = \frac{\text{Pa} \cdot \text{m}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}}$ ELLER $R = \frac{\text{atm} \cdot \text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}} \Rightarrow$ ENHETSANALYS

- 1 mol gas vid $T = 25^\circ\text{C}$ och $p = 1 \text{ atm}$ har VOLYMEN $V = 22,4 \text{ dm}^3$.

- Gasmolekylerna rör sig kaotiskt och studsar mot behållarens väggar \Rightarrow TRYCK

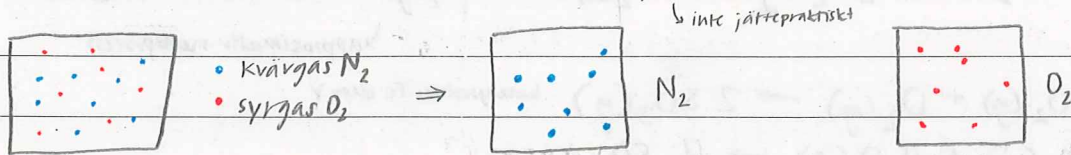
- Vad är TEMPERATUR?

Hastigheten för molekylerna uttrycks som $v = \left(\frac{3RT}{M} \right)^{1/2}$ där M är massan för partiklar.

Rörelseenergin är $E_{\text{kin}} = \frac{3}{2} \cdot kT$

- Gaslagen härstammar från Kinetisk gasteori (modern 1600-talskemi)
- Antagande om inga krafter mellan molekyler
- Hastighetsfördelning

KONCENTRATION av en GAS [mol/dm³]



Vi skriver koncentrationen som partialtryck istället för mol/dm³

$$P_{TOT} = \frac{n_{TOT} RT}{V} = \frac{(n_{O_2} + n_{N_2}) RT}{V} \quad P_{N_2} = \frac{n_{N_2} RT}{V} \quad P_{O_2} = \frac{n_{O_2} RT}{V}$$

PARTIALTRYCK: $P_{N_2} = \frac{n_{N_2} RT}{V}$ vi vet: $P_{TOT} = \frac{n_{TOT} RT}{V} \Rightarrow \frac{RT}{V} = \frac{P_{TOT}}{n_{TOT}}$

$$P_{N_2} = \frac{n_{N_2} \cdot P_{TOT}}{V}$$

Vi inför koncentrationsmätter MOLBRÅK: $X_{N_2} = \frac{n_{N_2}}{n_2}$

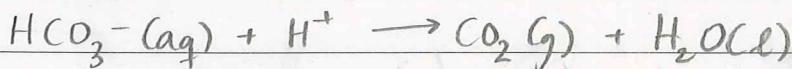
$$P_{N_2} = \frac{n_{N_2} \cdot RT}{V} = \frac{n_{N_2} \cdot P_{TOT}}{n_{TOT}} = X_{N_2} \cdot P_{TOT}$$

⇒ **partialtryck = molbråk · totaltryck**

MOLBRÅK: $X_{N_2} + X_{O_2} = \frac{n_{N_2}}{n_{TOT}} + \frac{n_{O_2}}{n_{TOT}} = \frac{(n_{N_2} + n_{O_2})}{n_{TOT}} = \frac{n_{TOT}}{n_{TOT}} = 1$

⇒ summan av alla molbråk är 1.

SOCKERKAKA



En fast syra i bakpulvret (som i övrigt består av stärkelse) reagerar med bikarbonat och ger koldioxid som blåser upp degen.

HUR mycket bakpulver behövs till en sockerkaka?

$$n = \frac{pV}{RT}$$

Vi antar: $p = 1 \text{ atm}$, $V = 0,5 \text{ dm}^3$ gasat $\Rightarrow V = 1 \text{ dm}^3$ de hållet försimmer

$$p = 1,01 \cdot 10^5 \text{ Pa} \quad V = 1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$

$T = 25^\circ\text{C} = 298\text{K} \Rightarrow$ starttemp. slutar på 100°C (vätska i kakan)



$$n = \frac{1,01 \cdot 10^5 \cdot 0,001}{298 \cdot 8,314} \approx 0,04 \text{ mol CO}_2 \Leftrightarrow n(\text{NaHCO}_3) = 0,04 \text{ mol}$$

$$M(\text{NaHCO}_3) = 23 + 1 + 12 + 3 \cdot 16 = 84 \text{ g/mol}$$

$$m(\text{NaHCO}_3) = n \cdot M = 0,04 \cdot 84 = 3 \text{ g}$$

Normaldos bakpulver: 1 tsk = 5 ml \approx 4,2 g värdar < 50% av NaHCO₃ (s)

$\Rightarrow m(\text{NaHCO}_3) < 2 \text{ g}$ vilket är RIMLIGT

 \rightarrow  Kakan sjunker ihop \Rightarrow VARFÖR?

Temperaturen sjunker:

$$pV = nRT \Rightarrow V = \frac{nRT}{p}$$

$$V_1 = \frac{nRT_1}{p}$$

$$V_2 = \frac{nRT_2}{p}$$

$$\left. \begin{array}{l} V_1 = \frac{nRT_1}{p} \\ V_2 = \frac{nRT_2}{p} \end{array} \right\} \frac{V_1}{V_2} = \frac{T_1}{T_2} \Rightarrow V_2 = \frac{V_1 \cdot T_2}{T_1} = \frac{298 \cdot 0,5}{373} = 0,4 \text{ dm}^3$$

↓
minskning med 1 dl.

VÄTGAS

- Aktuellt som mycket "rent" bränsle



- Framställning idag: $(\text{CH}_2)_m + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow m\text{CO}_2(\text{g}) + n\text{H}_2(\text{g})$

↑ naturgas \Rightarrow inte miljövänligt...

- Vill framställa mha elektrolys mha solenergi

OM INTE GASLAGEN FUNKAR

- Van der Waalsekvationen: $(p+a)(V-nb) = nRT$

a = attraktion
b = repulsion

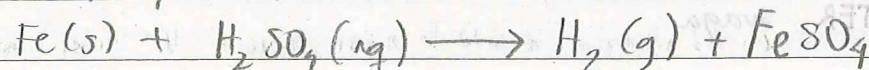
- Virial ekvation: $pV = nRT \left(1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2} \dots \right)$

9/9

MOHRS SALT: inlämningsuppgift

$$1) c(\text{H}_2\text{SO}_4) = 2,5 \text{ mol/dm}^3 \quad c = \frac{n}{V} \Rightarrow V = \frac{n}{c}$$

$$n(\text{Fe}) = 0,05 \text{ mol}$$



ALLTÅ: $n(\text{Fe}) = n(\text{H}_2\text{SO}_4)$

$$V = \frac{0,05 \text{ mol}}{2,5 \text{ mol/dm}^3} = 0,02 \text{ dm}^3 = 0,02 \text{ l} = 2 \text{ cl}$$

2) 1 mol H_2SO_4 , GER 1 mol H_2 , $T = 25^\circ C = 25 + 273,15 = 298,15 K$

$P = 1 \text{ bar} = 1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ $n = 0,05 \text{ mol}$ $PV = nRT$ $R = 8,314 \frac{\text{Pa} \cdot \text{m}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}}$

$V = \frac{nRT}{P} = \frac{0,05 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{Pa} \cdot \text{m}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298,15 \text{ K}}{1 \cdot 10^5 \text{ Pa}} \approx 0,001239 \text{ m}^3 = 1,24 \text{ dm}^3$

$E_{\text{kin}} = \frac{3}{2} RT = \frac{3}{2} kT$

↑
per mol

↑
per molekyl


$k = \frac{R}{N_A} \Rightarrow$ Temperatur är kinetisk energi.

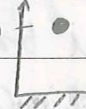
16/9

Björn

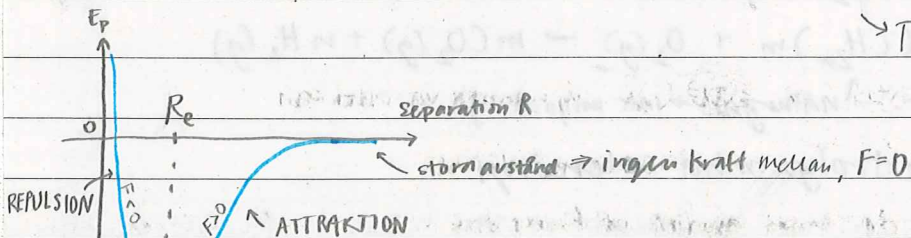
KRAFTER MELLAN MOLEKYLER

- beror på avståndet mellan molekylerna (R)
- jämviktsläge när repulsion & attraktion tar ut varandra
- VÄXELVERKAN: KRAFT eller ENERGI ← vanligaste begreppet i kemi

$F = mg$ 

$E_p = mgh$ 

→ TVÅ olika SYNSÄTT



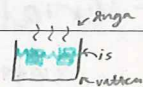
→ kostar energi att tvinga molekylerna att vara nära varandra

JÄMVIKTSAVSTÅND


repulsion = attraktion

$F = 0$, $F = -\frac{dE_p}{dR} \Rightarrow F$ är derivatan av E_p

INTERMOLEKYLÄRA KRAFTER: mellan \Rightarrow gas, vätska, fast form?

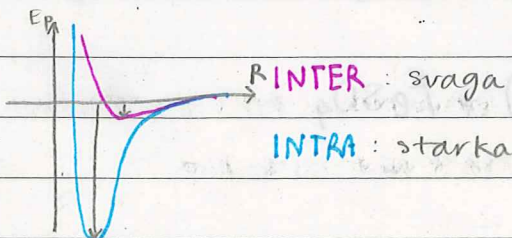


internet ↕↔

INTRAMOLEKYLÄRA KRAFTER: inom \Rightarrow kemisk bindning 

intranät ○

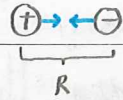
\Rightarrow SKILLNAD!



REPULSION: e^- stöter bort varandra $\leftarrow \ominus \quad \ominus \rightarrow$

ATTRAKTION:

1. jon-jon

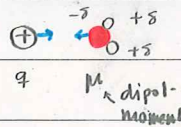


$$E_p = C \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{R}$$

$$C = \frac{1}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0}$$

Attraktion om q_1 och q_2 har olika tecken (samma tecken ger repulsion)

2. jon-dipol

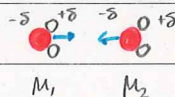


$$E_p = -C \cdot \frac{q \cdot \mu}{R^2}$$

Eftersom det även finns repulsion från andra sidan dipolen är jon-dipol mer känsliga för avståndet.

Dipolmoment: kolla i tabell. Givet så är $\mu = \delta \cdot l$

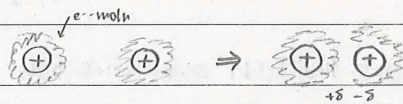
3. dipol-dipol



$$E_p = -C \cdot \frac{\mu_1 \cdot \mu_2}{R^3}$$

En attraktion ger upphov till en negativ potentiell energi.

4. London



dynamisk växelverkan

(inducerad dipol-dipol)

$\alpha_1, \alpha_2 =$ polariserbarhet

↳ inducerad dipol

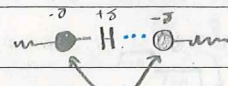
Finns det inget annat så finns det alltid Londonväxelverkan.

$$E_p = -C \cdot \frac{\alpha_1 \cdot \alpha_2}{R^6}$$

fler e^- ger större α

Nettoeffekten är alltid attraktion. Små avstånd!

5. Vätebindning



N, O eller F \Rightarrow elektronegativa









Elektrostatisk växelverkan som är STARK då H är väldigt liten.

Är beroende på hur molekylerna orienterar sig \Rightarrow som starkast när molekylerna är rakt emot varandra.

EGENSKAPER HOS VÄTSKOR

- Kokpunkt: attraktiv kraft mellan molekyler \Rightarrow kondenserar. Fler e^- ger starkare London \Rightarrow högre kokpunkt.
- Fryspunkt: låg temperatur \Rightarrow organiserar sig med så låg E_p som möjligt
- Ytspänning: molekyler växelverkar med varandra. H_2O H_2
- Viskositet: ämnen blir trögflytande ju mer krafter det finns mellan molekylerna i ämnet.

STRUKTURER hos FASTA ämnen

- SiO_2 : kvarts  och glas 
- Kol: grafit , diamant , fulleren  och grafen  ett enda kollager
- Tätt packade ämnen: metaller  och jonkristaller  \Rightarrow gör att räknar 25% tomrum

ATOMER - KVANTMEKANIK (Kap 1)

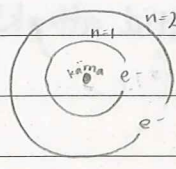
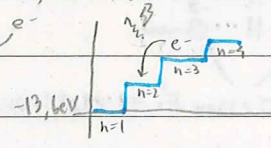
23/9
Botmidsson

KVANTISERING: energi överförs mellan materia och elektromagnetisk strålning i "paket" (kvanta).
Energien för kvanta:

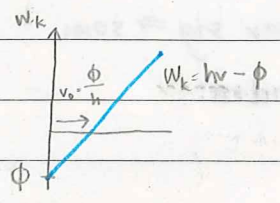
$$E = h\nu$$

↑ ljusets frekvens
↑ Plancks konstant $6,626 \cdot 10^{-34}$

Svartkroppsstrålning: ALLT avger strålning pga dess temperatur \Rightarrow högre temp ger större emittans. (Max Planck)

BOHRMODELLEN (1913):  Varje "bana" har en specifik energi  (Nå Bohr)

Fotoelektrisk effekt: belysa en yta med kortvärgigt ljus för att få e^- att avgas från ytan (1905) \Rightarrow måste finnas tillräckligt med energi per kvanta: utträdesarbete (tröskelvärdet)

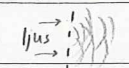


$$h\nu = \phi + \frac{mv^2}{2}$$

↑ frekvens ↑ W_k hos e^-

(Einstein)

INTERFERENS: Ljus kan bete sig både som partiklar (fotoner) och vågor (DUALISM)

⇒  konstruktiv & destruktiv interferens GER diffraktionsmönster

⇒ Även "riktiga" partiklar har vågegenskaper (Louis-Victor de Broglie)

Elektroner: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$ → saker med liten massa visar dessa egenskaper

↑ våglängd ↑ impuls

→ Ger upphov till ett diffraktionsmönster som om e⁻ vore ljus.

Osäkerhetsprincipen: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{2}$ där $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ (Werner Heisenberg)

↑ var partikeln befinner sig ↑ impuls

→ Vi kan inte observera utan att påverka ⇒ oavsett hur mycket vi försöker kan vi aldrig veta var e⁻ befinner sig.

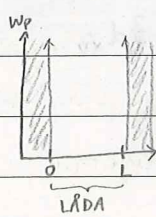
Schrödingerekvationen: $\hat{H}\Psi = E\Psi, \hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z)$ egenvärdesekvation

↑ Hamiltonoperatorn ↑ vågfunktion

↑ W_k ↑ W_p

→ Motsvarigheten till Newtons andra lag för små partiklar. (Erwin Schrödinger)

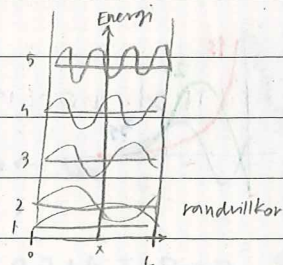
→ Partikel i en endimensionell låda:

 $V=0 \quad \nabla^2 \equiv \frac{d^2}{dx^2}$

$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi, 0 \leq x \leq L \Rightarrow \Psi$ måste vara lika med noll

Lösningar: $E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$ för $n=1, 2, 3, \dots$

$\Psi_n = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ för $0 \leq x \leq L$



⇒ Alla dessa utom Planck fick Nobelpris när de var under 40.

Vi får ut: kvantisering

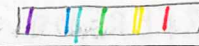
nollpunktsenergi (konsekvens av våg)

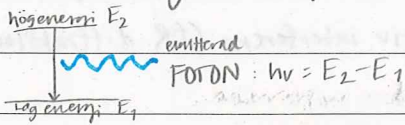
energi - antal noder ⇒ mer energi GER fler svängningar

lådans längd: stor låda gör att kvantiseringen förminskar

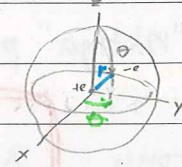
⊗ Born-tolkning → $\Psi^2 =$ sannolikhetstäthet

SPEKTROSKOPI

- kvantisering i energinivåer ger spektra för atomer 



ATOMMODELL: $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \Psi + V\Psi = E\Psi$ $V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$



→ energiegenvärdet beror endast av huvudkvanttalet, n

$$E_n = \frac{h^2 R}{n^2}, \quad R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Rydbergs konstant

→ Vågfunktioner:
(orbitaler)

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

kvanttal tre dimensioner dimension av kvanttal

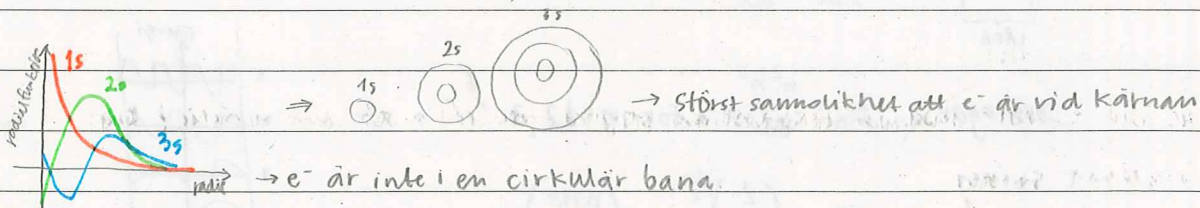
ATOMORBITALER

- Fyra kvanttal specificerar vågfunktionen

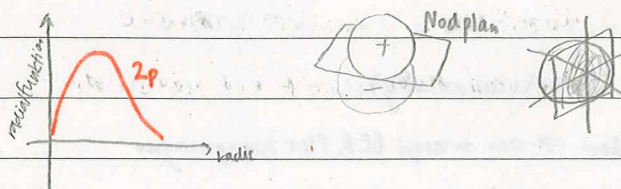
- 1 n = huvudkvanttal: 1, 2, 3, 4... (motsvarar K, L, M, N)
- 2 l = bikiquanttal: 0, 1, 2, 3... n-1 (s, p, d, f) cirkulär eller kuglar vid kärnan ORBITALER
- 3 m_l = magnetiskt bikiquanttal: -l, l-1, ..., l bestämmer FORM
- 4 m_s = spinnkvanttal: -1/2, +1/2 ↑↓ samma orbital ⇒ motsatt spinn

- Atomorbitaler betecknas enligt n l m t.ex. 3p_x, 4s, 3d_{xy}

S-ORBITALER (bikiquanttal = 0)



P-ORBITALER (bikiquanttal = 1)




D- & F-ORBITALER

- Dubbla nodplan : D : övergångsmetaller
- F : längre ner i periodiska systemet.

ELEKTRONSPINN

- e^- bär en egen kvantisering \Rightarrow har spin $\uparrow m_s = +\frac{1}{2}$ $\downarrow m_s = -\frac{1}{2}$

Vad händer efter väte? (två eller fler e^-)

- Högre kärnladdning
- Elektronrepulsion
- Penetration och skärmning  e^- i yttre skal "ser" inte kärnans laddning
- Balanserade repulsiva & attraktiva krafter
- För orbitaler med samma huvudkvanttal (skal) gäller att orbitalenergierna ÖKAR med biquanttalet $s < p < d < f$

SKÄRMNING

s- e^- har större sannolikhet att befinna sig nära kärnan och upplever därför en högre kärnladdning.

PAULI PRINCIPEN

Varje e^- i en atom har en unik uppsättning kvanttal \Leftrightarrow max $2e^-$ per orbital och då med antiparallellt spin.
(parat)

HUNDS REGEL

Då två e^- har samma biquanttal strävar de efter att, om möjligt, ha

parallellt spin $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow$
1s 2s 2p

AUFBAUPRINCIPEN

Gör att vi kan bestämma elektronkonfigurationen i grundtillståndet.

Vid stigande atomnummer fylls e^- på från 1s och uppåt med växlande


spin enligt Pauliprincipen. $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$
1s 2s 2p

PERIODISKA EGENSKAPER

- Atomradier : minskar från vänster till höger, ökar uppifrån & ner (pga skärmning)
- Jonradier : anjon är större än katjon
- Jonisationsenergi : $M(g) \rightarrow M^+(g) + e^-$ Energi för att ta bort e^-
- Elektronaffiniteter : $A(g) + e^- \rightarrow A^-(g)$ Energi frigjord när e^- försinner.

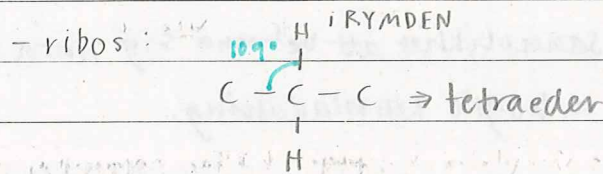
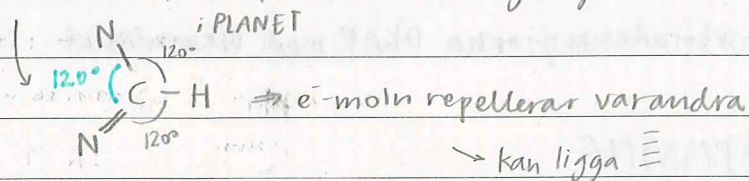
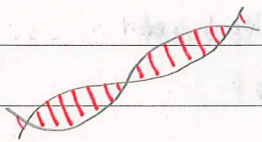
BIOKEMI - intro

23/9

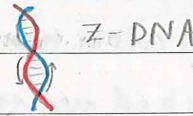
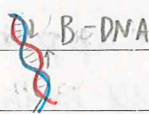
Kemisk reaktion : hur ser molekylerna ut? 
hur mycket energi "krävs" i reaktionen? ⚡
hur fort går reaktionen? Ⓢ

Björn

DNA-molekylen : - uppbyggd av fosfat & ribos ("ryggrad") samt kvävebas (A, T, C, G) - två strängar ger dubbelhelix



- kan vara HÖGER- eller VÄNSTERspiral.

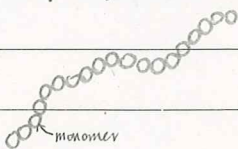


→ styrs av sockret.

Biopolymerer : - lång "sträng" uppbyggd av mindre byggstenar : monomerer.

Ex) nukleotider ⇒ DNA

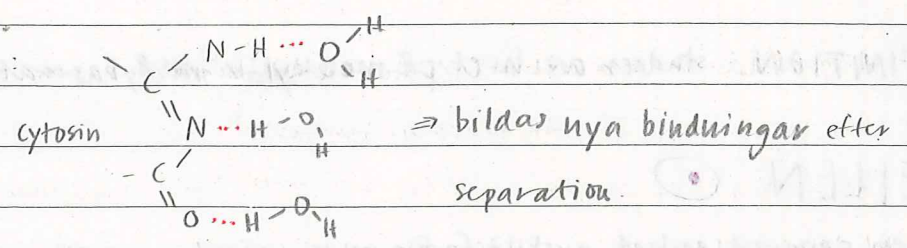
aminozyror ⇒ protein



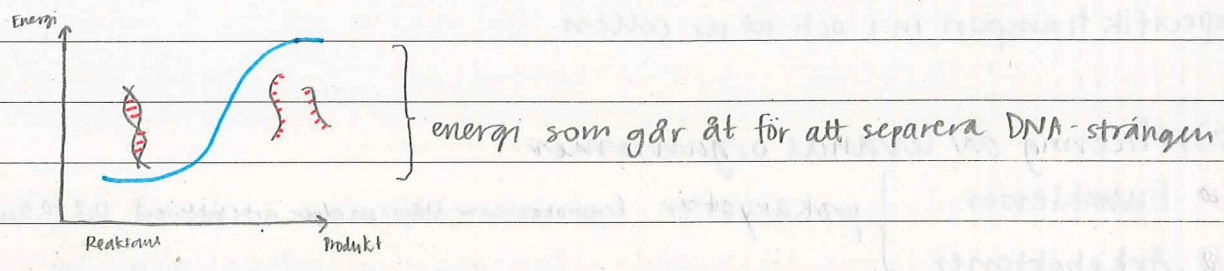
Interkalering : - molekyler interkalerar (tar sig in) mellan två baspar och ändrar strukturen.

Ex) cancerogena ämnen, spiropyran

Strängseparation:

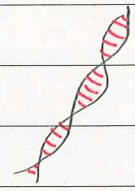
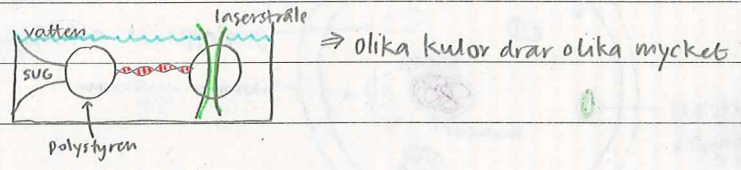


Energiprofil:



→ Tillföra energi:

- ① Värma : kinetisk energi 80°C
DNA-chip $\begin{matrix} C & G \\ A & T \end{matrix}$ ⇒ mäta koncentration av gener
- ② ATP (adenintrifosfat) kemiskt lagrad energi
ATP → ADP + P + energi ⚡
- ③ Arbete: mekanisk kraft



Intermolekylära krafter: håller samman strängarna i dubbelhelixen (vätebindningar)

Intramolekylära krafter: ser till att strängarna inte går sönder (kovalenta bindningar)

Energiprofil:

