

REPETITION Biokemi

DEFINITION: studier av livet på molekylär nivå, baserat på kemi

23/9

Eva Albers

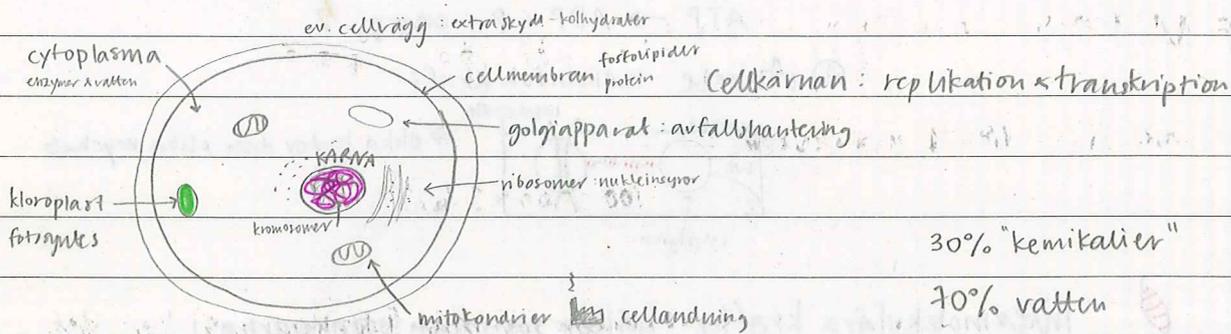
CELLEN

- en separat enhet, avskild från omgivningen av ett membran
- inne i cellen råder **homeostas** (konstanta förhållanden)
- specifik transport in i och ut ur cellen

Klassificering av levande organismer

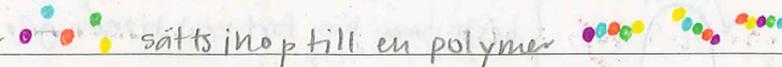
- ⊕ Eubakterier } prokaryoter (cyanobakterier, blågrönalger, ärkebakterier) 0,2 - 0,5 μm
- ⊕ Arkebakterier }
- ⊕ Eukaryoter - jäst, svampar, alger, växter, djur 10 - 50 μm

CELLENs uppbyggnad



⇒ 28% av grundämnen närvarande i organismer

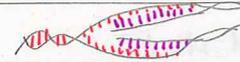
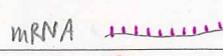
⇒ 92% av molekylerna är C, H, O, P och S : livet är **KOLBASERAT** +
vätebindningar **VIKTIGA**

Polymerser: monomerer  sätts inop till en polymer

- kan kombineras på många olika sätt: **VARIATION** i egenskaper
- metalljoner & organiska föreningar kan petas in ⇒ variation

MONOMER	ENKEL POLYMER	MAKROMOLEKYL
aminosyra	peptid	protein
nukleotid	oligonukleotid	nukleinsyra, DNA
monosackarid	oligosackarid	polysackarid

DNA → PROTEIN

- replikation  - bygger från 3' till 5' mha enzym
- transkription mRNA 
- translation  - energikrävande

PROTEINSYNTESEN

- varje gen kodar för ett protein
- promotorregion styr genuttrycket
- ett kodon består av 3 nukleotider
- startkodon och slutkodon på gen säger till när och hur proteinet tillverkas
- specifika kodon för varje aminosyra

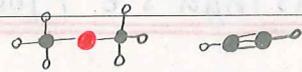
⇒ termer kommer ut på Ping Pong

30/9

Wf Jäglid

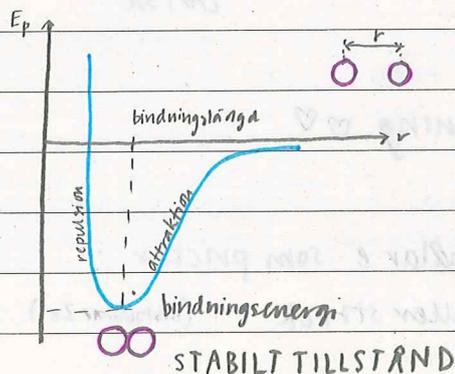
Föreläsningbilder på Ping Pong

KEMISK BINDNING



→ bindningar INOM molekyler: **intramolekylära krafter**

100 - 200 kJ/mol



Är atomerna för långt från varandra finns det inga krafter mellan, och trycks de ihop kommer de repellera varandra.

JONBINDNING:

$$E_{p,12} = \frac{z_1 \cdot e \cdot z_2 \cdot e}{4\pi \epsilon_0 r_{12}} = \frac{2,307 z_1 z_2}{r_{12}} \cdot 10^{-19} \text{ J} \quad (r_{12} \text{ mäts i nm})$$

- Ökat avstånd mellan katjon och anjon ger minskad energi
- 250 - 300 kJ/mol ⇒ STARK växelverkan
- Ex) NaCl: 70% joniskt, 30% kovalent
- Katjoner med hög laddning är SMÅ → korta avstånd (r)
- Anjoner med hög laddning är STORA (många e⁻)

- Joner reagerar för att få ädelgaskonfiguration \Rightarrow vill ha FULLA SKAL
- Bildas joner som får ädelgaskonfiguration + d-skala

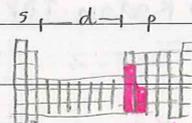
INERTA PAR: atomer som ger joner med olika laddning Ex) In^+ och In^{3+}

\rightarrow finns e^- som skärmar av yttre e^- utanför finns e^- som kan avges i två steg:

$-5p \quad \uparrow$
 $-5s \quad \uparrow\downarrow \quad \Rightarrow \text{In}^+ : [\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2$
 $\quad \quad \quad \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \quad \text{In}^{3+} : [\text{Kr}] 4d^{10}$

Övergångsmetallerna: $[\text{ädelgas}] (n-1)d^m (n)s^0$

- Först fyller man 4s, sedan 3d.
- När man tar bort tar man e^- från 4s, behövs det mer tar man från d.
- Det finns inga s- e^- i joner.

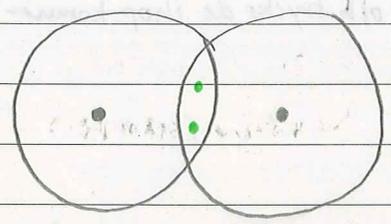


inert par-effekten

\Rightarrow TRÄNA på e^- -konfiguration!

Ex) Koppar: man vill tro " $4s^2 3d^9$ " men det är FEL. RÄTT: $4s^1 3d^{10}$
 $\Rightarrow \text{Cu}^+ : 3d^{10} \quad \text{Cu}^{2+} : 3d^9 \quad [\text{Ar}] 3d^{10}$

KOVALENT BINDNING: elektronparbindning $\heartsuit \heartsuit$

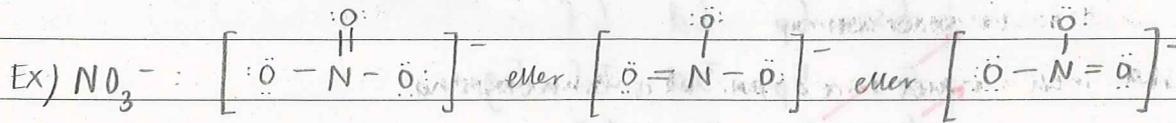


Lewisstruktur: malar e^- som prickar eller streck — (motsvarar $2e^-$)

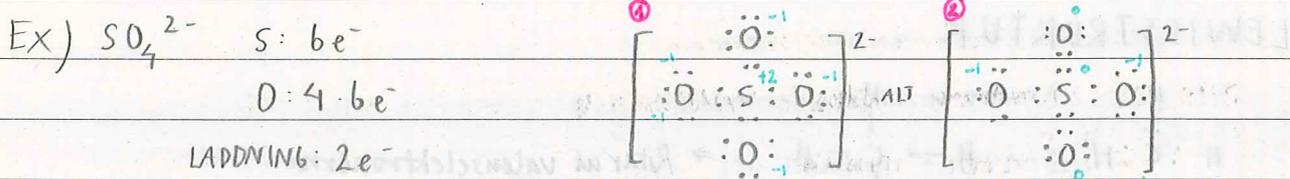
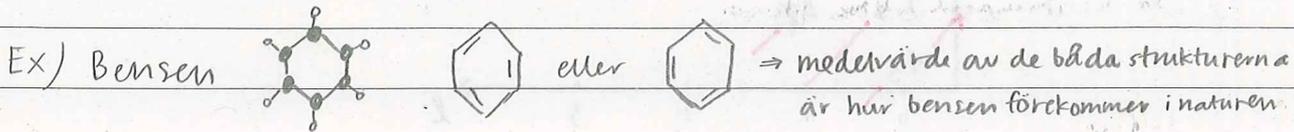
- Styr av **elektronegativitet**
- **TUMREGEL**: om skillnaden i elektronegativitet är större än 2 dominerar jonbindning: $\Delta x > 2 \Rightarrow \text{jonbindning}$

- Elektronegativitet är ett mått på förmåga att dra åt sig e^- .
- Elektronaffinitet: tvingar på $e^- \Rightarrow$ exoterm för anjoner, endoterm för anjoner.
- Joniseringsenergi: avlägsnar e^- och får en energi ⚡

RESONANSSTRUKTURER: Finns flera möjliga Lewisstrukturer



- Ämnen med flera resonansstrukturer är oftast STABILA



$32e^- = 16e^-$ par **OBS!** svavel följer inte alltid oktettregeln.

\Rightarrow d- och p-orbitalerna har väldigt lika energi \Rightarrow kan ta emot e^- i d-orbitaler

FORMELL LADDNING

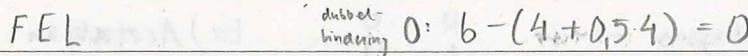
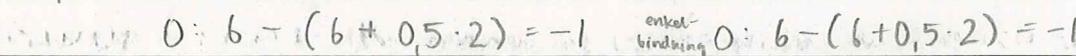
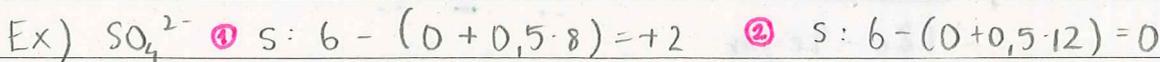
$$\text{Formell laddning} = V - (L + 0,5S) \quad \text{för en viss atom}$$

V = antal valenselektroner på den fria atomen

L = antal fria e^-

S = antal delade e^-

\Rightarrow Den mest stabila strukturen (LIGST ENERGI) ges av den Lewisstruktur som har formell laddning närmast noll på alla atomer.



RÄTT

\Rightarrow Bäst med negativa laddningar på de mest elektronegativa atomerna.

BINDNINGSSTYRKA

- Ökar med bindningsordning
- Minskar med antalet fria e^- -par på grannatomerna
- Minskar när atomradierna ökar
- Resonans stabiliserar molekyler \Rightarrow fler resonansstrukturer gör att den totala bindningsstyrkan ökar.

7/10

KOM IHÅG

Utf Jäglid

- Jonbindning = elektrostatisk bindning
- Kovalent bindning = dela e^- mellan sig
- Elektronegativitet = förmåga att ta upp e^-
- Polär kovalent bindning (HCl , HF) = ena atomen drar mer i e^-
- Metallbindning = metallatomerna delar på ett elektronhav (mobila bindningse $^-$)
- Finns även koordinationsbindning = jon-dipol-attraktion fast bindning
- Lewisstrukturer = beskriver valense $^-$ i en molekyl
- Formell laddning = anger mest stabila resonansstrukturen.

VSEPR

- ▷ bygger på att minimera repulsionen mellan negativt laddade e^- -par och bindningar
- ▷ går ut på att placera molekylens e^- -par & bindningar så långt från varandra som möjligt.

Ex) H_2O $H:\ddot{O}:H$ Lewis \Rightarrow HUR göra för att få e^- så långt från varandra som möjligt?

tetraeder:  \Rightarrow molekylgeometri: böjd molekyl, VSEPR: avseende på e^- & bindningar \rightarrow tetraedisk

- ▷ dubbel- och enkelbindning räknas på samma sätt \Rightarrow samma geometri för resonans former.

Ex) CH_4 $\begin{array}{c} H \\ | \\ H:C:H \\ | \\ H \end{array}$ Molekylgeometri: tetraedisk
VSEPR: tetraedisk \Rightarrow fria e^- -par

VSEPR-GEOMETRI

- ▶ Fria e^- -par trycker ihop molekylgeometrin, varför vatten är en tetraeder enligt VSEPR men en böjd molekylgeometriskt sett.
- ▶ VSEPR är alltid plantrigonal (120° mellan varandra i planet) när det finns tre elektronpar.
- ▶ Vid fyra e^- -par är VSEPR tetraedisk: tetraeder, trigonal pyramid NH_3 , böjd ($2 \text{ fria } e^- \text{ par}$)
- ▶ Fem e^- -par \Rightarrow trigonal bipyramid (3st i planet, två pyramider) *gunnbräda*
- ▶ Sex e^- -par \Rightarrow oktaeder
- ▶ Sju e^- -par \Rightarrow pentagonal bipyramid (5st. i planet, en uppe och en nere)

\Rightarrow Fria e^- -par ger SKILLNAD mellan molekylgeometri och VSEPR.

e^- -par	VSEPR	
2	linjär	$x-A-x$
3	plantrigonal	$x-A-x$ x
4	tetraeder	$x-A-x$ x
5	trigonal bipyramid	$x-A-x$ x
6	oktaeder	$x-A-x$ x
7	pentagonal bipyramid	$x-A-x$ x

REPULSION $\leftarrow \ominus \ominus \rightarrow$

HÖG LÅG

mellan fria e^- -par > mellan bindande & fria e^- -par > mellan bindande e^- -par

...

...

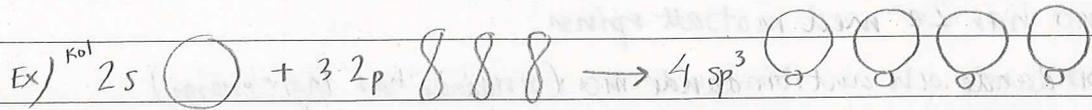
\Rightarrow många fria e^- -par gör att bindningsvinkeln trycks ihop.

Ex) CH_4 : $109,5^\circ$ NH_3 (ett fritt e^- -par) : $107,3^\circ$ H_2O : $104,5^\circ$ (två fria)

HYBRIDORBITALER

- Använda atomorbitaler för att få fram geometrier.
- Linjär kombination av atomens orbitaler, Ex) kol: $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$
- \Rightarrow får hybridorbitaler $\phi \rightarrow$ kallar för $s^x p^y$ där x och y är antal s - och p -orbital. Ex) Kol: sp^3 -hybridorbital

- hybridorbitalerna ϕ är en vågfunktion $\phi = \frac{1}{2} [(s) + (p_x) + (p_y) + (p_z)]$
- ϕ^2 beskriver elektrontätheten
- hybridorbitalerna hänger alltid ihop.



- tetraediska strukturer är alltid sp^3 -hybridiserade

Antal hybridorbitaler	Hybridisering ^{centralatomen}	Elektronarrangemang
2	sp	linjär
3	sp^2	plantrigonal
4	sp^3	tetraedrisk
5	sp^3d	trigonal bipyramid
6	sp^3d^2	oktaedrisk

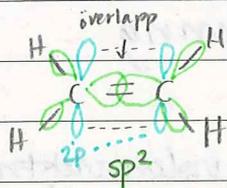
--- är samma som + + +

^h antal använda atomorbitaler

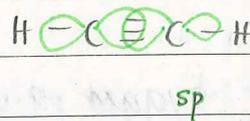
Ex) Hybridisering av kolatomen

ATOMÄRT	TETRAEDRISKT	PLANTRIGONALT	LINJÄRT
C_{2p}	Csp^3	C_{2p_z}	$C_{2p_{x,y}}$
C_{2s}		Csp^2	Csp

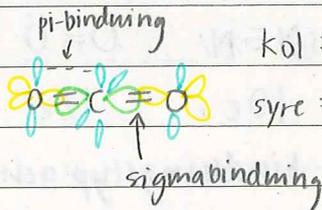
Ex) Eten



Etyn



Koldioxid



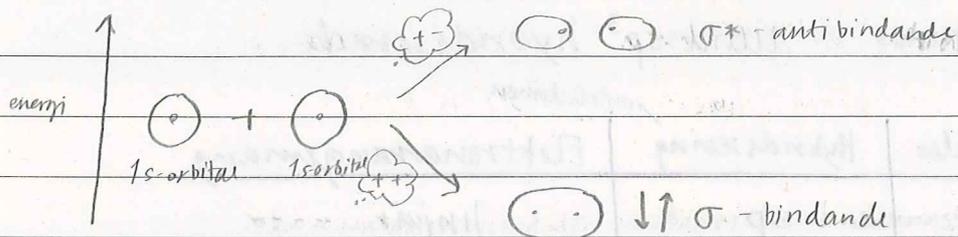
kol: $sp \Rightarrow 2 p$ -orbital kvar

syre: $sp^2 \Rightarrow 1 p$ -orbital kvar

\Rightarrow utgå från antal e^- -par vilket ger hybridisering, och lägg till p -orbitaler för att få rätt antal.

MOLEKYLORBITALER

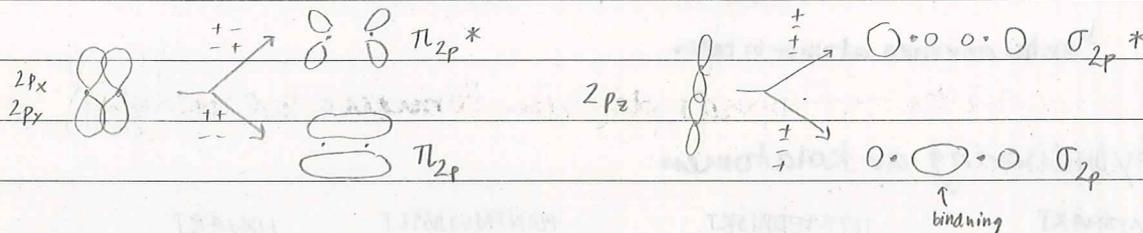
- ∞ överlapp mellan olika atomers atomorbitaler (ao)
- ∞ ao måste ha snarlik energi så att de kan överlappa
- ∞ varje mo har $2e^-$ med motsatt spinn.
- ∞ finns bindande och antibindande mo (bindande har lägre energi)



bindningsstal = 1

- ∞ bindande & antibindande e^- tar ut varandra vid bindningsstalsräkning

P-orbitaler



Läsipp!

oparade e^- = paramagnetiskt 1

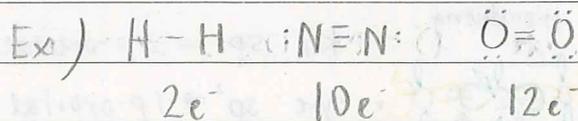
parade e^- = diamagnetiskt 2

SAMMANFATTNING Kemisk bindning

14/10

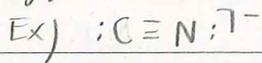
Björn

- Lewisstrukturer - bygger på utplacering av valenselektroner.

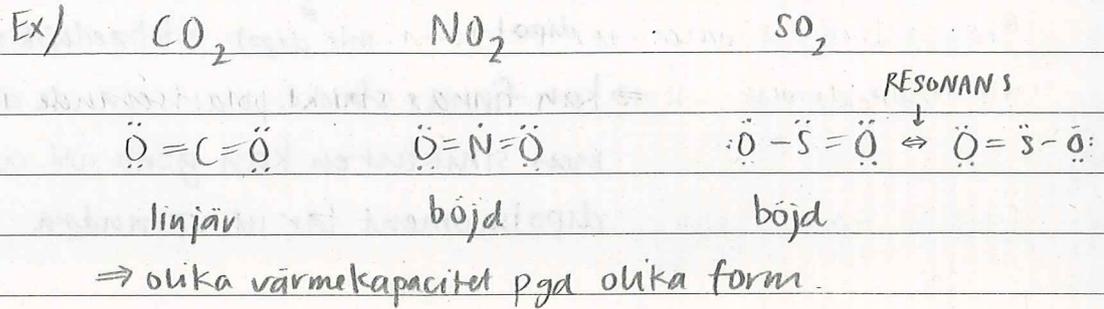


- Vi får reda på bindningstyp och antal fria elektronpar

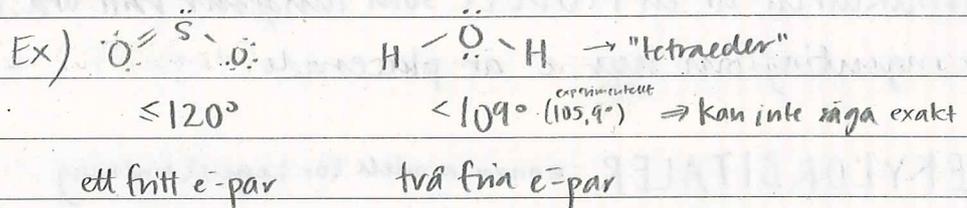
- Joner (Lewis) - lägga till e^- om negativ jon, ta bort e^- om positiv.



- VSEPR: ta reda på molekylens form utifrån bindningar och fria elektronpar



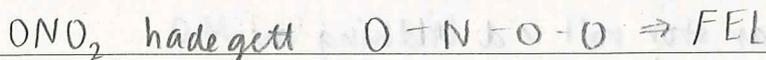
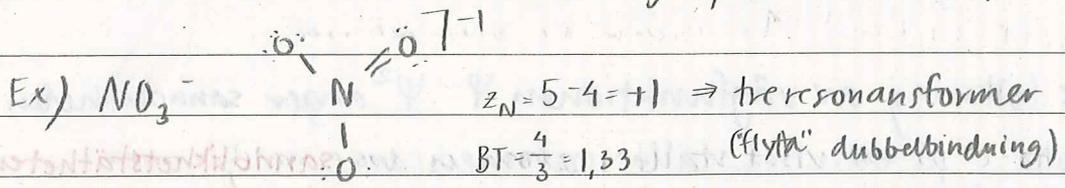
• En molekyl kan vara böjd av olika anledningar



- Bästa Lewisstrukturen uppnås där den formella laddningen är så låg som möjligt.

- Centralatomen anges av

- 1) namn
- 2) symmetri
- 3) Lägst jonisationsenergi



- Lewis används för

- ▷ bindningstal
- ▷ 3D-struktur (VSEPR)
- ▷ Lewis-syra och Lewis-bas

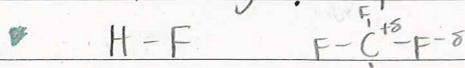
} inom molekylen

framt e⁻-par avg e⁻-par

NH_4^+ NH_3

- Lewis används för ▶ bestämning av möjlighet till vätebindningar

▶ bestämning av dipol



dipol

inte dipol \Rightarrow tetraedisk struktur

\Rightarrow kan finnas starkt polariserande ämnen,
men strukturen kan göra att ev.
dipolmoment tar ut varandra

▶ bestämning om ett ämne är en jon.

- Lewisstrukturen är en MODELL som fungerar rätt bra, men den säger ingenting om hur e^- är placerade.

\Rightarrow MOLEKYLORBITALER : annan modell för kemisk bindning

LEWIS $\text{H}-\text{H}$

$\text{H}-\text{F}$

$\text{F}-\text{F}$

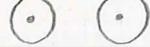
MO 

 (ψ^2)



1s 1s

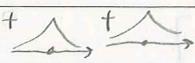
4% 96%

AO 

e^- moln förskjutet
pga F:s elektronegativitet

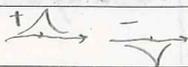
Borns tolkning av vågfunktionen Ψ : Ψ^2 anger sannolikheten
att hitta e^- på ett visst ställe i atomen, dvs. sannolikhetsstätheten.

Tecknet på Ψ spelar stor roll vid bildning av MO

AO 

Man måste addera ihop vågfunktionerna
innan man kvadrerar.

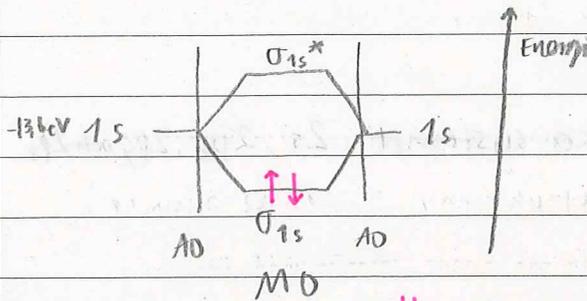
 bindande



 antibindande Varje orbital kan innehålla $2e^-$.



Vi kan ställa upp ett energidiagram för MO

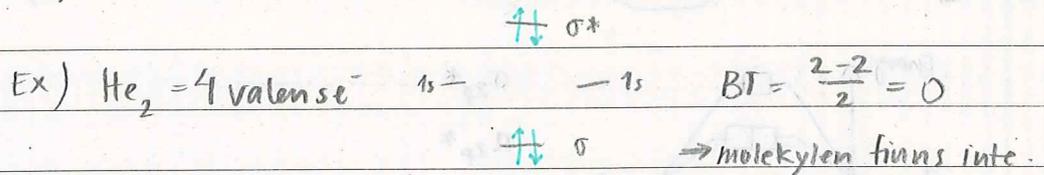


Det är alltså bäst energimässigt för e^- att bilda en σ -bindning då denna har lägst energi.

$H_2 = 2$ valenselektroner placeras ut med början i den lägsta molekylorbitalen

Bindningstal: $BT = \frac{n - n^*}{2}$ där n = bindande e^- , n^* = antibindande e^-

\Rightarrow anger bla ifall en viss molekyl kan existera.



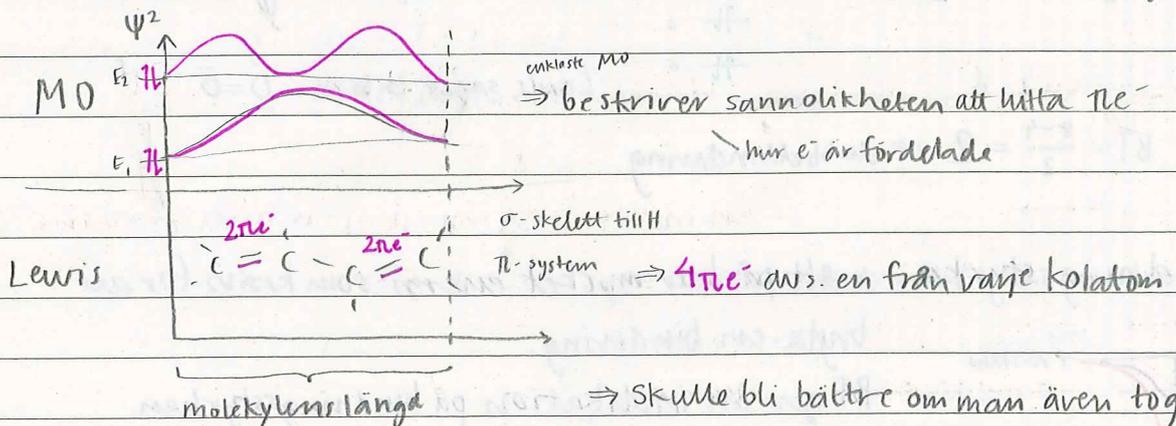
- MO beskriver hur e^- är förskjutna i molekylen:

Skillnad i elektronegativitet säger vilken atom som drar mest i e^-
 ΔX

ΔX anger POLAR eller KOVALENT bindning

$2 > \Delta X > 2$

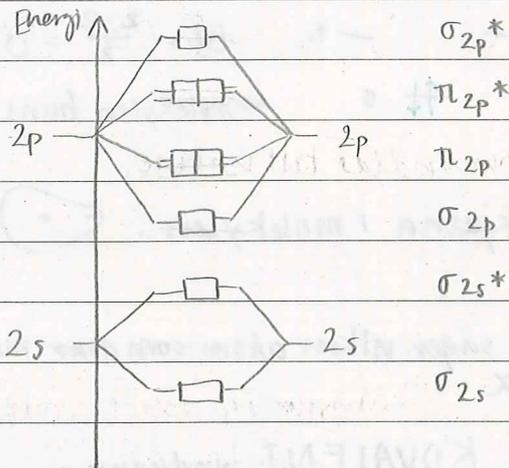
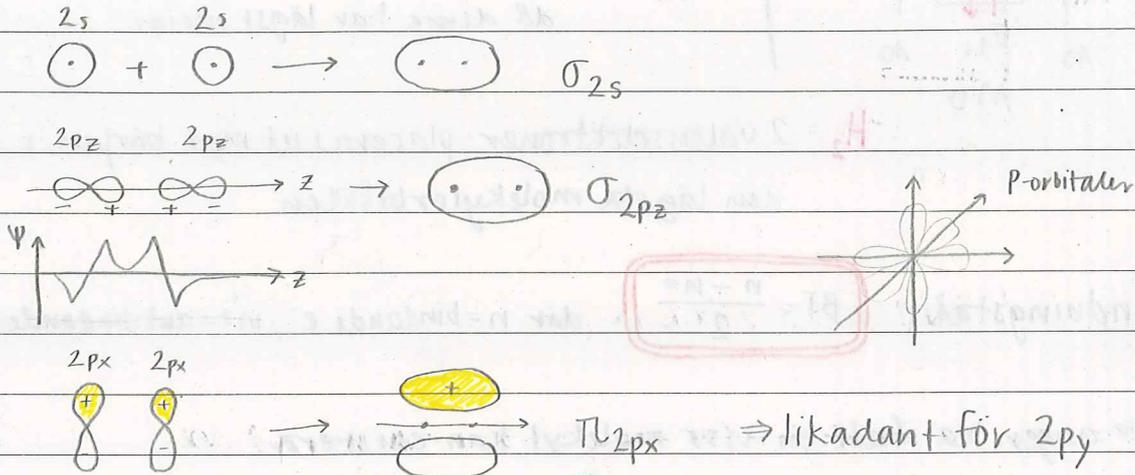
- Partikel i lådan: använder oss av π -elektronerna i en molekyl



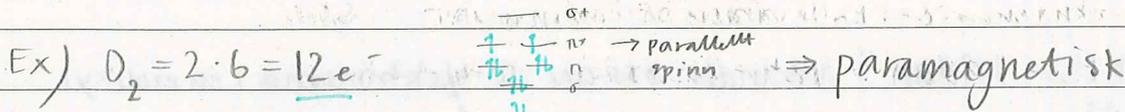
\Rightarrow skulle bli bättre om man även tog hänsyn till σ -elektroner.

För molekyler med fler atomorbital hos ämnena blir energidiagrammet annorlunda.

Andra radens atomer ur periodiska systemet: $2s$, $2p_x$, $2p_y$ och $2p_z$



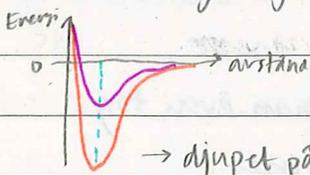
- MO ger en bättre beskrivning av vissa ämnen än Lewis



Lewis säger enbart $\ddot{O}=\ddot{O}$

$BT = \frac{8-4}{2} = 2 \Rightarrow$ dubbelbindning

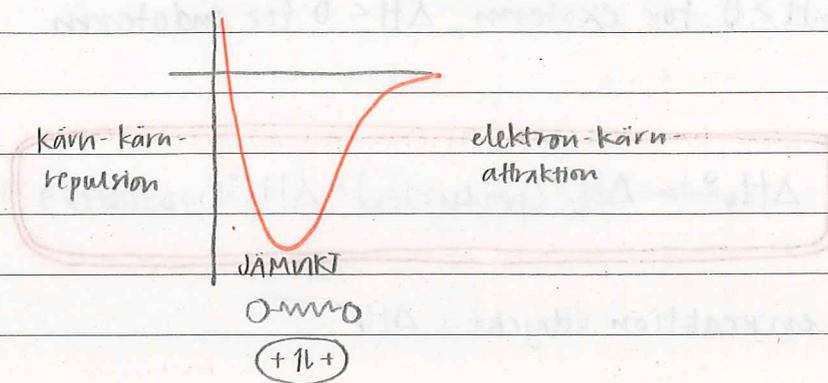
- Bindningsstyrka: mätt på hur mycket energi som krävs för att bryta en bindning.



\rightarrow djupet på gropen = bindningsstyrka

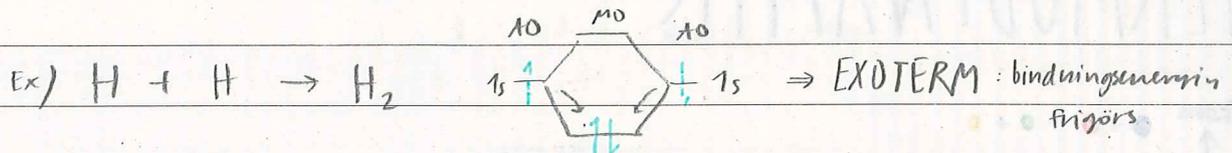
BT ger en indikation på bindningsstyrkan.

- Bindningsstyrka

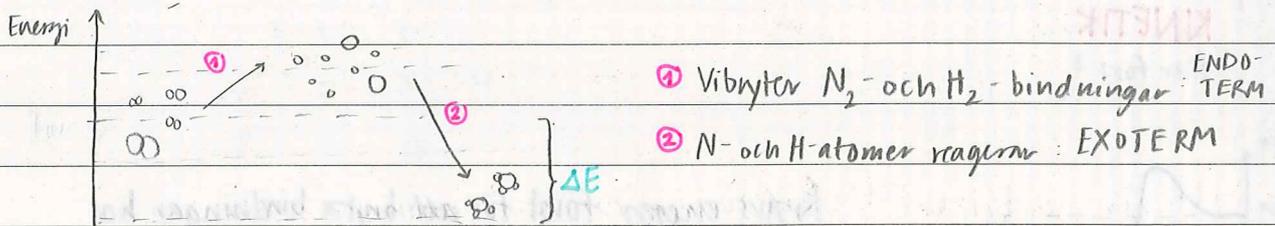
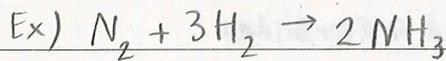


KEMISKA REAKTIONER

- Atomer bildar molekyler för att de tjänar energi på det



- Atomernas potentiella energi omvandlas till värme.



Beräkna energier: kolla värden på bindningsstyrka i tabell

$$E_{IN} = 1 \cdot 932 + 3 \cdot 424 = 2204 \text{ kJ} \quad 1 N_2 + 3 H_2$$

$$E_{UT} = 6 \cdot 388 = 2328 \text{ kJ} \quad 6 N-H$$

$$\Delta E = E_{IN} - E_{UT} = 2204 - 2328 = -124 \text{ kJ} \Rightarrow \text{EXOTERM}$$

NETTOREAKTION

\Rightarrow Krävs ofta energi först för att bryta bindningar, men man får ut mer energi när de frigjorda atomerna reagerar.

ENTALPI

$$\Delta H = -q_{\text{ut}}$$

$\Delta H > 0$ för exoterm, $\Delta H < 0$ för endoterm

- Reaktionsentalpi:
$$\Delta H_r^\circ = \Delta H_f^\circ(\text{produkter}) - \Delta H_f^\circ(\text{reaktanter})$$

⇒ nettoenergin från en reaktion uttryckt i ΔH_r° .

OBS! Reaktionen MÅSTE vara balanserad för att man ska kunna räkna på den.

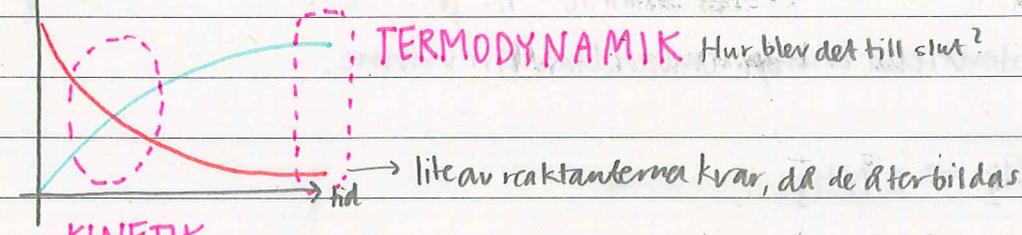
TERMODYNAMIK

LP2

28/10

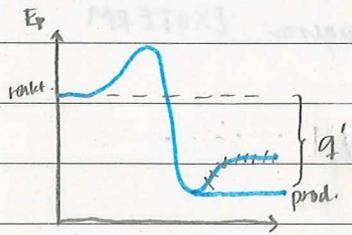
Björn

konc



KINETIK

Hur fort?



Krävs energi först för att byta bindingar hos reaktanter = **aktiveringsenergi** (kinetik)

När produkterna bildas frigörs MYCKET energi.

q' anger hur det ser ut till slut (termo)

TERMODYNAMIKENS FÖRSTA HUVUDSATS ☺

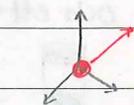
Energi kan inte skapas eller förbrukas, bara omvandlas (energiprincipen).

$$E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} + E_{\text{omgivning}} = \text{konstant}$$

↑
allting utanför systemet

MOLEKYLER S ENERGI

Kinetisk energi :



translation

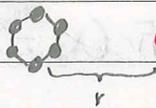


rotation

"••"

vibration \Rightarrow senare kurs

Potentiell energi :



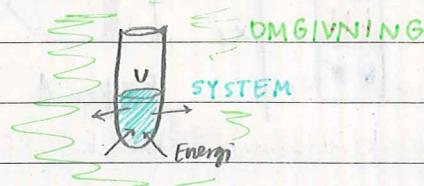
växelverkan mellan molekyler

jon-jon, jon-dipol, vätebindning, London ...

\Rightarrow Lagra energi i systemet

Inre energi (U) :

$$U = \sum (E_{kin} + E_{pot})$$



Termodynamiken förklarar TILLSTÄND.

sluttillstånd - starttillstånd

f

i

Standardtillstånd: Gaser & rena ämnen: $p = p^\circ = 1 \text{ bar}$

= Upplöst ämne $c = c^\circ = 1 \text{ M}$

Processer: isoterm $T_f = T_i$

isobar $p_f = p_i$

isokor $V_f = V_i$

adiabat inget värmeutbyte

Inre energi: kan ändras på två sätt: värme q och arbete w

$$\Delta U = w + q$$

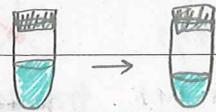
\Rightarrow växelverkan med omgivningen

ARBETE: tillförd energi ger ordnad kinetisk energi hos molekylerna. NYTTIGT.

VÄRME: oordnad kinetisk energi \Rightarrow svårt att göra något nyttigt av det.

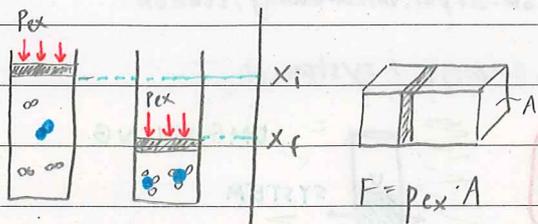
Värme + arbete : Exoterm ($q < 0$) ger $w > 0$ och ett arbete utförs

⇒ ofta volymminskning



konstant tryck

Tryck-volymarbete : $w = \text{kraft} \cdot \text{väg} = F \cdot (x_f - x_i) = p_{\text{ex}} \cdot A (x_f - x_i) =$



$$= -p_{\text{ex}} \cdot \Delta V$$

$$\Delta V = V_f - V_i$$

Kompression : $\Delta V < 0$

$$w > 0$$

Vid konstant tryck gäller

$$w = -p_{\text{ex}} \Delta V$$

Vid konstant volym gäller

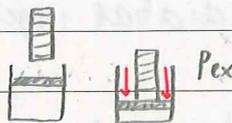
$$w = 0$$

$$\Delta V = 0$$

Om trycket ej är konstant

$$w = -\int p_{\text{ex}}(V) dV$$

Irreversibel process : snabb kompression



Reversibel process : mycket långsam kompression



$$p_{\text{gas}} = p_{\text{ex}}$$

$$w = -\int p_{\text{gas}}(V) dV$$

Isoterm, reversibel & ideal gas

↑
kyler gasen så
den inte blir
varm

$$w = -nRT \ln \left(\frac{V_f}{V_i} \right)$$

$$p_{\text{gas}} = \frac{nRT}{V}$$

$$p \propto \frac{1}{V}$$

$$\int \frac{1}{V} = [\ln V]$$