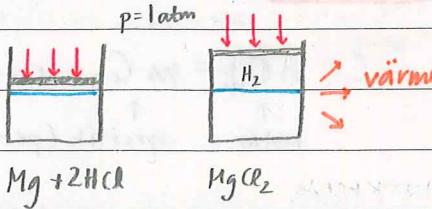


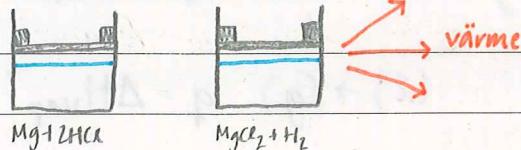
En del reaktioner utför ett arbete

Konstant tryck



En del av ΔU_r går dit till att trycka undan den omgivande luften \Rightarrow mindre värme till omgivningen.

Konstant volym



ENTALPI

$$\text{Konstant volym} \quad w = 0 \quad \Delta U = q_v$$

$$\text{Konstant tryck} \quad w = -p\Delta V \quad \Delta U = q_p - p\Delta V$$

$$q_p = U_f - U_i + p(V_f - V_i) = U_f + pV_f - (U_i + pV_i)$$

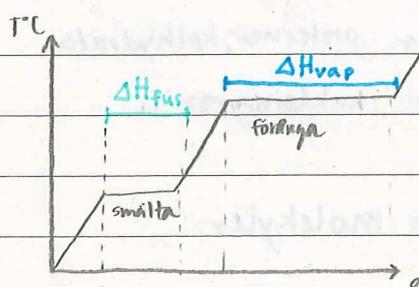
Vi inför entalpi : $H \stackrel{\text{definition}}{=} U + pV \Rightarrow q_p = \Delta H$

$$\Delta H = q_p < 0 \Rightarrow \text{EXOTERM} \quad \text{ex)} \text{ N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NH}_3(\text{g})$$

$$\Delta H = q_p > 0 \Rightarrow \text{ENDOTERM} \quad \text{ex)} \text{ CuO(s)} + \text{C(s)} \rightarrow \text{Cu(s)} + \text{CO(g)}$$

Spontan fast endoterm ... förklaras med entropi.

VÄRME



$\Delta H_{\text{fus}} = \text{smältentalpi}$

$\Delta H_{\text{vap}} = \text{fördunningsentalpi} : \text{H}_2\text{O(l)} \rightarrow \text{H}_2\text{O(g)}$

$$\Delta H_{\text{vap}} = \Delta H_f^\circ (\text{H}_2\text{O(g)}) - \Delta H_f^\circ (\text{H}_2\text{O(l)})$$

Värme beräknas som $q = C \Delta T$ för en viss fas (s, l, g)

C är varmekapacitet $C = n C_m = m C_s$

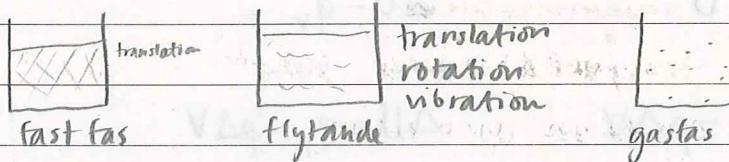
\uparrow molär \uparrow specifik (per gram)

Vid fasomvandling: (s) \rightarrow (l) $q = \Delta H_{\text{fus}}^\circ$ (smältning)

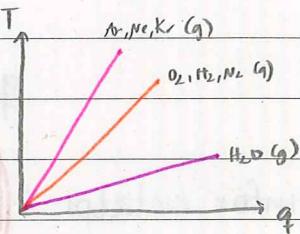
(l) \rightarrow (g) $q = \Delta H_{\text{vap}}^\circ$ (förvägning)

Motstånd mot att höja temperaturen ger hög varmekapacitet.

Ju större förmåga att lagra värme desto högre varmekapacitet.



C är LÄG för monoatomära ämnen
diatomära ämnen
HÖG multiatomära ämnen



Temperatur är ett mått på medelvärdet av den kinetiska energin

$$E_{\text{kin}} = \frac{3}{2} k T \quad k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \text{ (Boltzmannskonstant)}$$

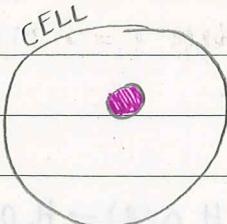
$$R = N_A k \text{ (allmänna gaskonstanten)}$$

BIOKEMI 1 Struktur & funktion av biokemiska molekyler

28/10

Eva Albers

paf på pingpong



Cellen består av: makromolekyler: proteiner, kolhydrater,

nukleinsyror

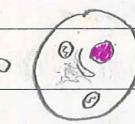
lipider

små organiska molekyler

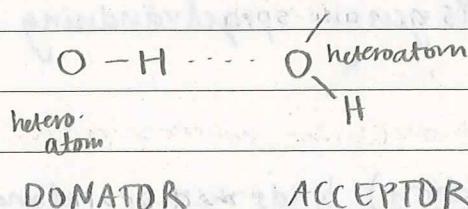
MAKROMOLEKYLER

- polymerer av många monomerer
- icke-kovalenta bindningar (intermolekylära krafter)
- struktur ger molekylen funktion och egenskaper.
 - ⇒ ändrad struktur ger ändrad funktion.
 - ⇒ viktig för läkemedelsindustrin.

PROTEINER

-  i cellen
 - enzymer
 - strukturproteiner: hår, hud...
 - försvarsproteiner
 - transport & kanaler 
 - upplagning av näring
 - reglering receptorer
 - muskelkontraktion och rörelse
- Består av aminosyror (finns 20 olika a.a.)
50 - 50 00 aminosyror
- Intermolekylära krafter mellan makromolekyler är svaga
⇒ fördelaktigt för t.ex. receptorer, ger möjlighet till dynamik, så att signaler kan sändas stötsvis och inte hela tiden.

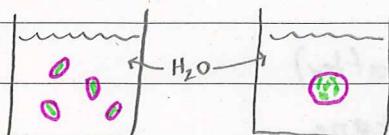
Vätebindning



Heteratomer: N, O, (S)

Viktiga grupper: OH, C=O, NH₂

HYDROFOB INTERAKTION



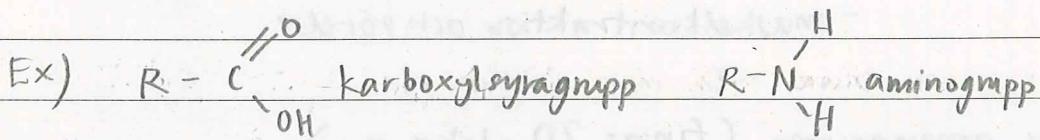
liko löser liko! Finns polära & opolära

HYDROFOB interaktion

Molekyler kan vara hydrofoba / hydrofila
lipofoba / lipofila

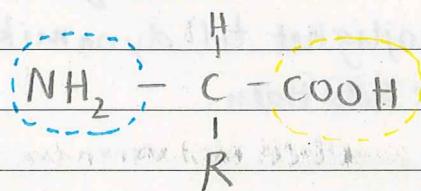
FUNKTIONELLA GRUPPER

- hydrofoba, hydrofila, polara osv.
- specifik kemisk funktion
- få samma egenskap på olika molekyler
- olika egenskaper på olika delar av en molekyl
- kan delta i icke-kovalenta bindningar



→ syra (kan ange proton) → bas (kan ta upp proton)

AMINOSYROR

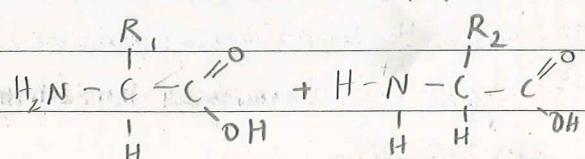


R är sidokedja - kan se olika ut och ha olika funktionella grupper

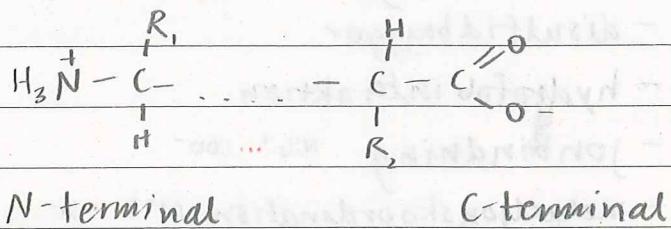
o Isomera former, L- och D-form, fås genom spegelväxning i stereocenter

o $\alpha + \alpha \rightarrow \text{aa}^{\pm \text{H}_2\text{O}}$ (kondensationsreaktion) binds med peptidbindning

o Peptidbindningen är stel



- Polypeptidkedjan är ogenad och har en RIKTNING



PROTEIN

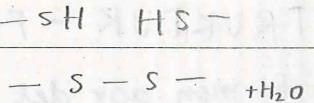
Primärstruktur: sekvens av aminosyror

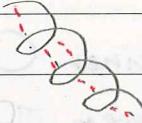
Sekundärstruktur: α -helix eller β -flak, böjar & loopar \Rightarrow vätebindningar

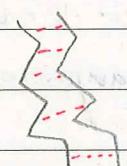
Tertiärstruktur: 3D-form

Kvartärstruktur: slutgiltig struktur

- Cystein - cystein binds med disulfidbrygga



- α -helix 
 - högervriden spiral
 - var fjärde aminosyra har vätebindning
 - 3,6 a.a.-rester per varv (0,56nm)

- β -flak 
 - peptidkedjorna ligger parallellt med varandra
 - vanligt med 4-5 kedjor, upp till 10 finns.
 - känslig för stora sidokedjor, då dessa kan hindra kedjorna från att komma nära.

\Rightarrow sidokedjorna hamnar på utsidan av helixen eller flaket.

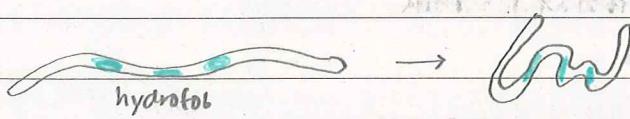
\Rightarrow har sina funktionella grupper fria.

\Rightarrow skapar icke-kovalenta bindningar med andra delar av peptidkedjan.

- Strukturen formas mha
 - vattenbindning
 - disulfidbryggor
 - hydrofob interaktion
 - jonbindning $\text{NH}_3^+ \dots \text{COO}^-$
 - metalljonskoordination $\text{M}^{n+} \dots \text{A}^-$

◦ Veckning (folding)

- nativ form
- energimässigt stabilaste formen. Ex) vatten utesluts från hydrofoba delar
- sker i flera steg
- skapas icke-kovalenta bindningar och disulfidbryggor.



- chaperoner = proteiner som hjälper till att veckla ihop.

STRUKTUR - FUNKTION

- formen gör det möjligt att bilda strukturer
- inbindning av komponenter
- anpassning till vissa miljöer: globulära proteiner
- membranproteiner

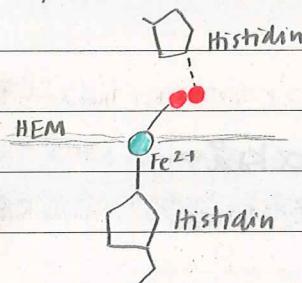
◦ Fibrösa proteiner

- ej vattenlösliga
- material som är motståndskraftiga
- keratin: hår, fjädrar, hull, klor, horn, skal
- ♥ makrofibrill → mikrofibrill → protofibrill: α -helixar
- ♥ trinnade runt varandra vattenbindningar & disulfidbryggor \Rightarrow STARKT.
- ♥ permanenta bryggor disulfidbryggorna - forma återskapa.
- kollagen: hud
- ♥ tre hoptrinnade kedjor \Rightarrow STARKT
- ♥ glycin i mitten som ger vattenbindningar

Hemoglobin

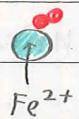
SYRETTRANSPORT

- globulärt
- syrebindande \rightarrow finns i blodet
- 4 subenheter: 2 α och 2 β
- vattenlösligt
- prostetisk grupp = organisk grupp, hem \Rightarrow binder till syret
- utan syre kallas den deoxyhemoglobin



Syret hålls på plats med vätebindning till histidin

Histidin hjälper Fe att hålla sig i sin trivärdiga form.



- Hb S-mutation ger upphov till sickle cell anemi



- sämre syrebindning

- fastnar lätt i kapillärerna

- ger ökad tolerans mot malaria

röda blodkroppar

Akvaporin

VATTENTRANSPORT

- finns i celler där det behövs ett stort vattenflöde

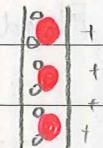
- 4 kanaler, 3 Å breda

- selektiv transport av H₂O (ej H⁺ och OH⁻)

8 } 2,8 Å

- joner repelleras i kanalen

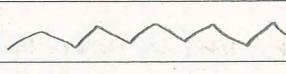
- dipolorienteringen gör att alla H₂O hamnar på "rätt" håll



LIPIDER

□ fettsyror

lipotilsavans



hydrokoltanurad

□ ickepolära lipider \Rightarrow lösliga i organiska lösningsmedel, olösliga i vatten

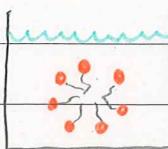
□ polära lipider \Rightarrow membran

↳ amfifiliska molekyler \Rightarrow kan bli membran, två delar

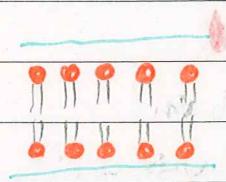
Amfifiliska lipider

polärt huvud

opolär svans



micell



dubbellager \Rightarrow MEMBRAN

- kolesterol ger styvhet till membran

- tät packning av fettsyrsavansarna påverkar också

\equiv tätt ger tjockare membran

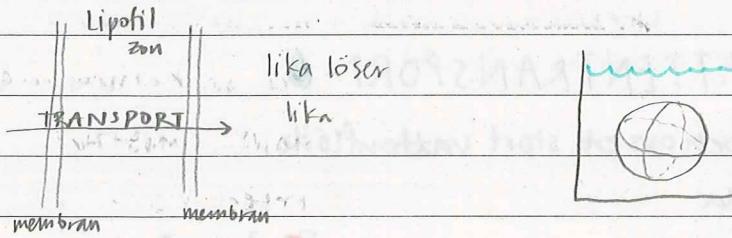
\equiv långa kedjor ger tätare packning

\star omättade fettsyror ger glesare packning

- lipiddubbellager i vattenmiljö

\triangleright flera zoner i membranet: hydrofila ytor och lipofil zon i mitten.

\triangleright viktigt för transport och komponenter i membranet.



- Fluiditet & flexibilitet: rotation och lateral diffusion går utan hinder

flip-flop \rightarrow byter plats \Rightarrow ofördelaktigt

- Permeabilitet & transport

- diffusion genom olika zoner

- små molekyler

- oladdade molekyler

- lipofila molekyler

- stora polära molekyler & joner släpps inte igenom

- sker mha transport- & kanalproteiner.

VARDAGSMOLEKYLER

1/11

Björn Åkerman

Andreas Eriksson

- Specificera produkten - märke osv.
- Frågor: Vad innehåller produkten?
Funktioner hos komponenterna?
Fördelar och nackdelar?
- Diskussion av funktioner ska knyta an till Lewisstrukturerna
- Miljö- & hälsospekter för framställning och användning
- Sök alternativ till respektive kemikalie och analysera konsekvenserna av bytet.
- Tänk på att knyta an kemikaliernas funktion till produkten
- Inlämning 1. 29/11: produkt + motivering (varför intressant?)
 - preliminärraport - det av kemikalie
 - val av komponenter
 - lewisstrukturer
 - referenser
- Läsperiod 3: - kommentarer från andra grupper.
 - textbearbetning ⇒ boka tid!
- Inlämning 2. 23/2-14: slutrapport
- Skrivprocessen är VIKTIG!
- Anpassa text efter målgrupp: struktur - stil - retorik
- Se till att de olika kemikalierapporterna ser likadana ut.

TERMODYNAMIKEKS ANDRA HUVUDSATSEN

4/11

Termodynamik: $\Delta U = w + q \rightarrow$ tillståndsfunktion

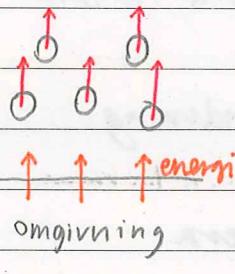
Per Lincoln

U beror på T, V, n_a, n_b och P

sammansättning

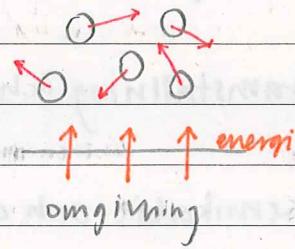
$U(T, V, n_a, n_b)$ eller $U(T, P, n_a, n_b)$

ARBETE

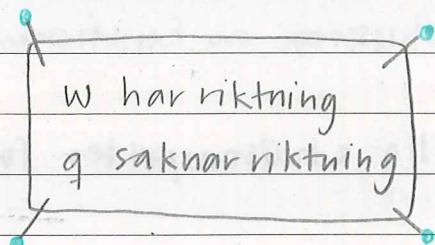


$$w > 0$$

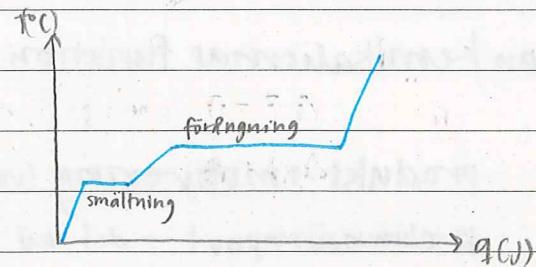
VÄRME



$$q > 0$$



Värmetillförsel:



Höja temp: $q = C_v \Delta T$

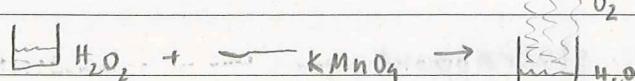
Förlänga: $q = n \Delta H_{\text{vap}}$

Isolerat system: Energin är lika stor FÖRE som EFTER en reaktion.

Sker inget byte av matorna, värme eller arbete

$$\Delta U = q + w = 0$$

Ex) $2 \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$ Väteperoxid sönderfaller till vatten och syrgas.



\Rightarrow Går enbart att det hänt, vatten och syrgas bildar inte väteperoxid spontant.

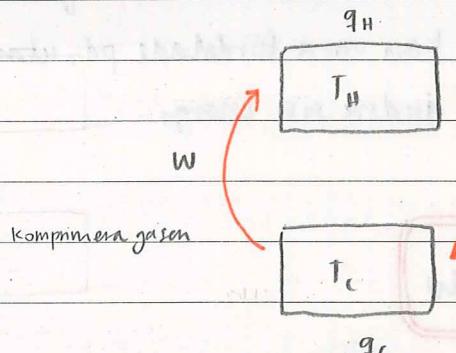
\Rightarrow Reaktionen är IRREVERSIBEL.

Andra hundradsatsen: Värme kan inte ångas från en kallare kropp till en varmare om inte samtidigt en annan därmed sammanhangande ändring inträffar.

 Clausius visade mha begreppet reversibel förändring¹ att det förutom energin V finns ytterligare en tillståndsfunktion - **entropin S** som definieras genom sin differential

$$dS = \frac{dq_{rev}}{T} \quad \leftarrow q \text{ ska vara reversibel}$$

$$S = [J/K]$$



Värmeutbyte från kallt till varmt
mha arbetsmedium (gas) pd
vilken det utförs ett arbete.
sker REVERSIBELT

$$\Delta S = 0 \quad (\text{mätt pd systemets sannolikhet})$$

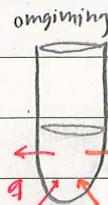
$$\Delta U = 0$$

Reversibel isotherm process (T konstant): $\Delta S = q_{rev}/T$

Reversibel adiabatisk process ($dq_{rev}=0$): $\Delta S = 0$

Reversibel isobar process (P konstant): $\Delta S = C_p \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right)$

vid små temp-förändringar kan C_p antas vara konstant.



Låt V vara konstant $\Rightarrow W = 0$, omgivningens temp är T och systemets T_s .

Om värmeutbytet är litet kan även systemets temp. antas vara konstant,

och $\Delta S_{sys} = q/T_s$

$$\Delta S_{tot} = \Delta S_{sys} + \Delta S_{surf} = \frac{q}{T_s} - \frac{q}{T}$$

Om $\Delta S < 0 \Rightarrow q < 0$
värme ånges till omgivningen

$\Rightarrow S$ kan BARA öKA.

\rightarrow Entropin minskar om värme överförs från kallare till varmare system.

SLUTSATS:

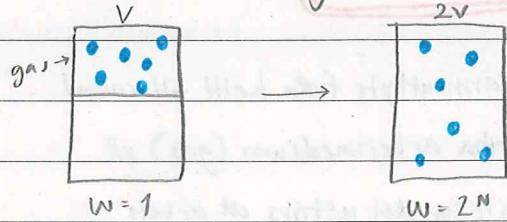
Första huvudsatsen: Energi kan varken skapas eller förgöras.

Andra huvudsatsen: Entropi kan skapas men inte förgöras.

$$\Delta S > 0 \text{ för en irreversibel process i ett isolerat system}$$

ENTROPI

- Rumsfördelning och sannolikhet

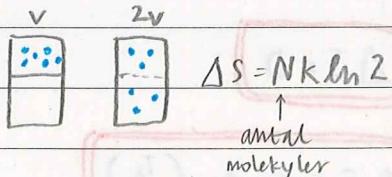


w är antal tillstånd som gasmolekylerna kan vara fördelade på, utan att ändra sin energi

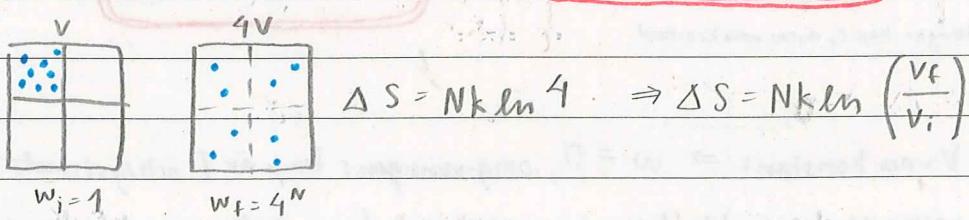
- Boltzmanns entropi: $S = k \cdot \ln w$

$$k \text{ är Boltzmanns konstant: } k = \frac{R}{N_A}$$

- Entropin ökar då en gas expandrar

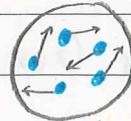
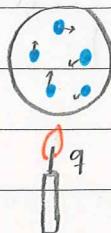


$$\Delta S = nR \ln \left(\frac{V_f}{V_i} \right)$$



- En process som ökar sin entropi kan driva en annan process som minskar sin entropi.

- Entropin ökar om varme tillförs



Låg T \rightarrow W ökar starkt

Hög T \rightarrow W ökar lite grann

- Definition av entropi

$$S = k \ln W$$

Wär molekylers möjliga tillstånd

$$\Delta S = \frac{q_{rev}}{T}$$

- Entropi för idealgas: Isokor: $\Delta S = C_V \ln (T_f / T_i)$

Isobar: $\Delta S = C_p \ln (T_f / T_i)$

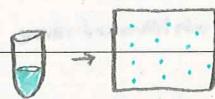
Isoterm: $\Delta S = nR \ln (V_f / V_i)$

- Entropi beroende av både V och T:

$$\Delta S = C_V \ln \left(\frac{T_f}{T_i} \right) + nR \ln \left(\frac{V_f}{V_i} \right)$$

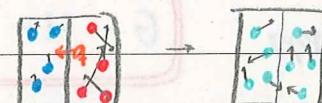
- Processer är SPONTANA om entropin ökar

VOLYM



$$\Delta S = Nk \ln (V_f / V_i) > 0$$

VÄRME

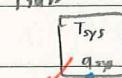


$$\Delta S = q_{rev} / T > 0$$

- Många processer drivs av att omgivningens entropi ökar

- Omgivningens entropiändring

T_{sur}



Claussius: $\Delta S_{sur} = q_{sur} / T$ ($\Delta S_{sur} > 0$ om $q_{sur} > 0$)

q_{sur}

1 H S: $q_{sur} = -q_{sys}$ ($\Delta S_{sur} > 0$ om $q_{sys} < 0$ dvs exoterm)

- Omgivningens entropi: $\Delta S_{\text{sur}} = q_{\text{sur}} / T_{\text{sur}} = -q_{\text{sys}} / T_{\text{sur}} = -\Delta H_{\text{sys}} / T_{\text{sys}}$

$$q_{\text{sys}} = \Delta H_s \quad (\text{konstant tryck})$$

$$\Rightarrow \Delta S_{\text{sur}} = -\frac{\Delta H_{\text{sys}}}{T}$$

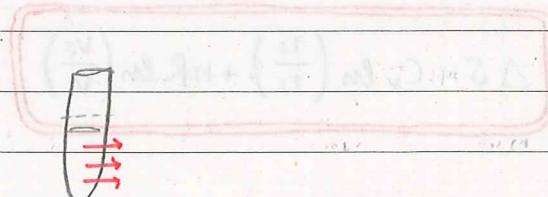
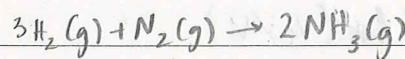
- Andra huvudsatsen: totala entropin ökar alltid vid spontan process.

$$\Delta S_{\text{tot}} = \Delta S_{\text{sur}} + \Delta S_{\text{sys}} \geq 0$$

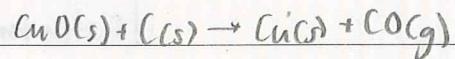
- $\Delta S = 0$ innebär JÄMNUKT.

- Två sätt att vara spontan:

① Exoterm



② Endoterm



- Gibbs fria energi: $G = \text{H} - TS$ skilnad i upptagna och tillverkade varme

$$0 \leq \Delta S_{\text{tot}} = \Delta S_{\text{sys}} + \Delta S_{\text{sur}} = \Delta S_{\text{sys}} - \frac{\Delta H_{\text{sys}}}{T_{\text{sys}}} \Rightarrow \Delta H - T\Delta S \leq 0$$

p, T konstanta

Spontan process: $\Delta G \leq 0$ Jämnkt: $\Delta G = 0$

- Gibbs fria energi ^sänker för spontan reaktion.

- Endoterm reaktion \Rightarrow SYSTEMET blir mer sannolikt

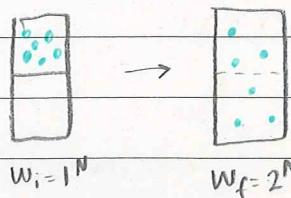
Exoterm reaktion \Rightarrow OMGIVNINGEN blir mer sannolik.

FYSIKALISKA REAKTIONER

11/11

Björn

Entropi: mätt på sannolikhet $S = k \ln W$



$$\Delta S = S_f - S_i = N k \ln 2$$

↑ antal molekyler

✓ enbart för ideal
gaser

$$\Delta S = C_v \ln \left(\frac{T_f}{T_i} \right) + n R \ln \left(\frac{V_f}{V_i} \right)$$

$$\Delta S = C_p \ln \left(\frac{T_f}{T_i} \right) \quad \text{Konstant tryck}$$

⇒ ökar med ökad **temperatur** och/eller **volym**

Boltzmann: $\Delta S = k \ln \frac{W_f}{W_i} \Rightarrow \frac{W_f}{W_i} = e^{\frac{\Delta S}{k}}$

↑ hur mycket mer sannolikt det är efter.

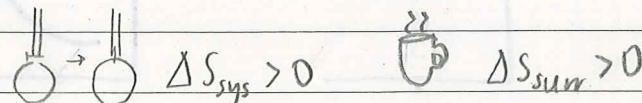
Ex) Från allt i luft i KE i en papperskorg

$$\Delta S = n R \ln \frac{V_f}{V_i} = \frac{500}{0,024} R \ln \frac{0,005 \text{ papperskorg}}{500 \text{ KE}} \Rightarrow \frac{W_f}{W_i} = \frac{1}{10^{1029}}$$

↑ $1 \text{ mol} \approx 24 \text{ dm}^3$

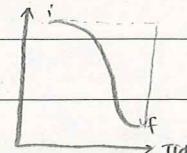
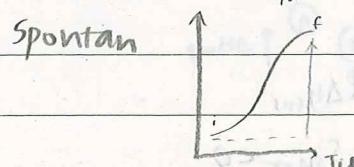
⇒ sannolikheten är oerhört låg: Låta apa trycka på random tangenten (1 i sekunden) och skriva Shakespeares samlade verk.

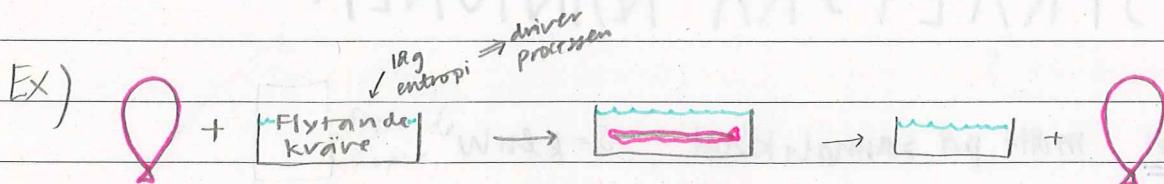
Andra huvudsatsen: $\Delta S_{\text{tot}} = \Delta S_{\text{sys}} + \Delta S_{\text{sur}} \geq 0$



Gibbs fria energi: $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$

$$\Delta S_{\text{fr}} = \Delta S_{\text{sum}} + \Delta S_{\text{sys}} > 0 \quad \Delta G_{\text{sys}} = \Delta H_{\text{sys}} - T \Delta S_{\text{sys}} < 0$$





$$\Delta S_{\text{tot}} = \Delta S_{\text{sur}} + \Delta S_{\text{sys}} > 0$$

$$pV = nRT \quad > 0$$

mindre volym
lägre T
 $(g) \rightarrow (e)$

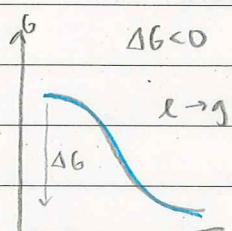
FASÖVERGÅNGAR

Fysikalisk reaktion: bryta intermolekylär växelverkan
bryts genom varmning

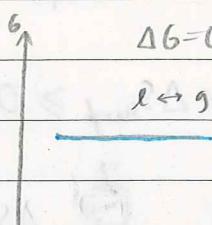


Kinetisk energi hos molekyler: $\frac{3}{2} RT$

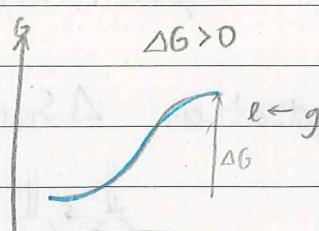
Kemisk reaktion: bryta intramolekylära bindningar
kan inte värmas



spontan

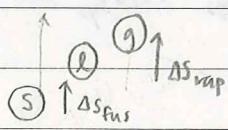


jämnkt



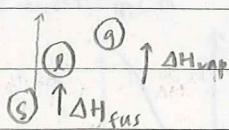
sker inte

$\Delta S > 0$



$\Delta S_{\text{sys}} > 0$

$\Delta H > 0$



$\Delta S_{\text{sur}} < 0$