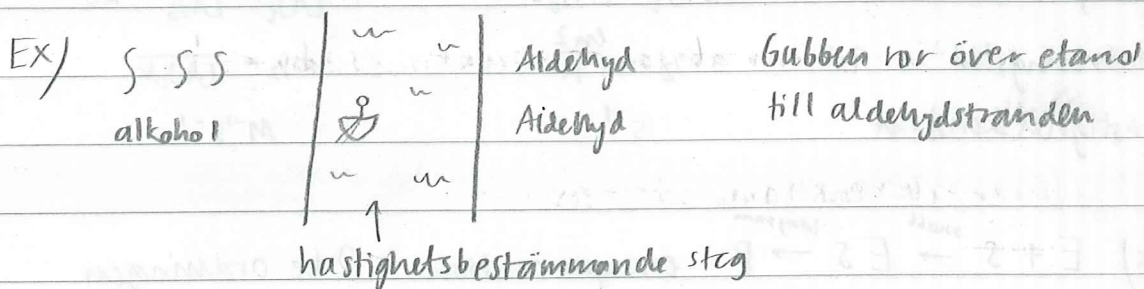


→ Vid god tillgång på substrat  $S$  så går enzymet på sin maxhastighet och reaktionen blir då oberoende av substratkoncentrationen (0:te ordningen)

$$v_{\max} = k_{\text{kat}} [E]_0$$



⇒ Nedbrytningen av alkohol är oberoende av mängden alkohol man druckit.

# KEMISKA REAKTIONER

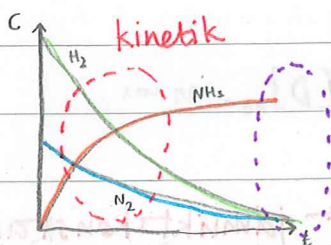
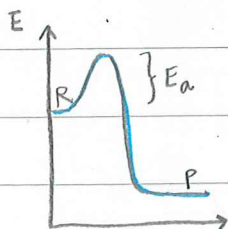
25/11

Björn Åkerman

- Fysikalisk reaktion: intermolekylära bindningar  
fast - flytande - gas

- Kemisk reaktion: intramolekylära bindningar  
kinetisk energi =  $RT$

- Energifil för reaktion



termodynamik

- Högre temp  $\Rightarrow$  snabbare reaktion :  $k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$

Elementarreaktioner	$A \rightarrow P$	$A + A \rightarrow P$
	<u>1:a ordningen</u>	<u>2:a ordningen</u>
hastighet	$r = k[A]$	$r = k[A]^2$
integrerad	$[A]_t = [A]_0 e^{-kt}$	$\frac{1}{[A]_t} = \frac{1}{[A]_0} + kt$
halveringstid	$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$	$t_{1/2} = \frac{1}{[A]_0 k}$
hastighetskonstant	$s^{-1}$	$M^{-1}s^{-1}$

Ex)  $E + S \xrightarrow{\text{snabb}} ES \xrightarrow{\text{långsam}} P$  enzymreaktion = 0:te ordningen

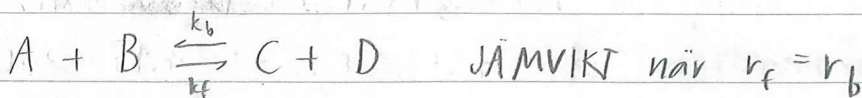
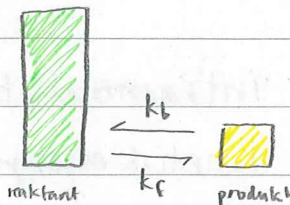
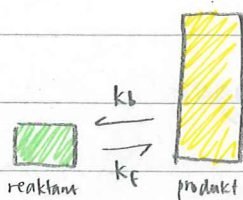
stort överskott av substrat :  $\frac{d[P]}{dt}$  är oberoende av  $[S]$

## JÄMVIKT

$\Rightarrow$  Koncentrationer efter att jämvikt ställt in sig beror på hastighetskonstanterna.

$$k_f > k_b$$

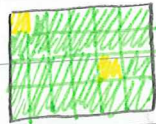
$$k_f < k_b$$



$$k_f [A]_{eq} [B]_{eq} = k_b [C]_{eq} [D]_{eq} \leftarrow \text{equat}$$

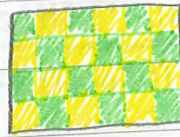
$$\frac{[C]_{eq} [D]_{eq}}{[A]_{eq} [B]_{eq}} = \frac{k_f}{k_b} = K \leftarrow \text{jämviktskonstant}$$

$$\rightleftharpoons K = \frac{[\text{produkter}]}{[\text{reaktanter}]} \text{ eq}$$



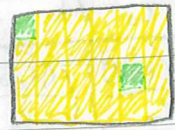
litet K

mest reaktant



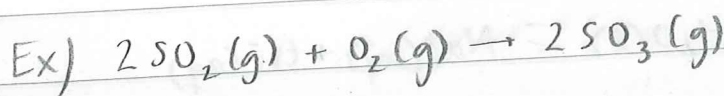
K=1

lika



stort K

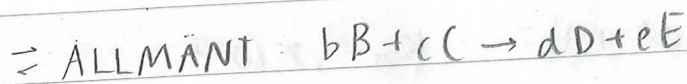
mest produkt



$$k_f [\text{SO}_2]^2 [\text{O}_2] = k_b [\text{SO}_3]^2 \quad \leftarrow \text{antal mol}$$

$$K = \frac{[\text{SO}_3]^2}{[\text{SO}_2]^2 [\text{O}_2]} \Rightarrow K(RT) = \frac{p(\text{SO}_3)^2}{p(\text{SO}_2)^2 p(\text{O}_2)} \quad \text{konstant vid visst } T$$

$\uparrow$  partialtryck

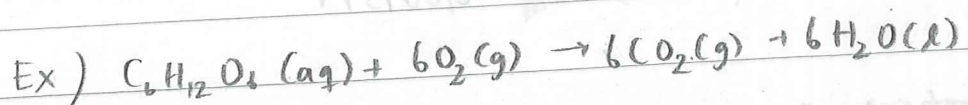


$a_j$ : aktivitet (dimensionslös koncentration)

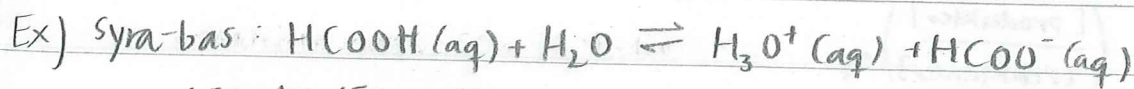
GASER:  $a_j = \frac{p_i}{p^0}$  där  $p^0 = 1 \text{ bar}$

UPPLÖST ÄMNE:  $a_j = \frac{[J]}{c^0}$  där  $c^0 = 1 \text{ M}$

RENT FAST/FLYTANDE:  $a_j = 1$  Lösningsmedel betraktas som rent vatten



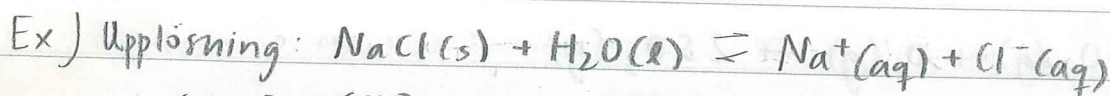
$$K = \frac{\left(\frac{p_{\text{CO}_2}}{p^0}\right)^6 \cdot 1}{\frac{[\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6]}{c^0} \cdot \left(\frac{p_{\text{O}_2}}{p^0}\right)^6}$$



$$K = \frac{\left(\frac{[\text{H}_3\text{O}^+]}{c_0}\right) \left(\frac{[\text{HCOO}^-]}{c_0}\right)}{\left(\frac{[\text{HCOOH}]}{c_0}\right) \left(\frac{[\text{H}_2\text{O}]}{c_0}\right)} = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{HCOO}^-]}{[\text{HCOOH}] \cdot 1} = K_a$$

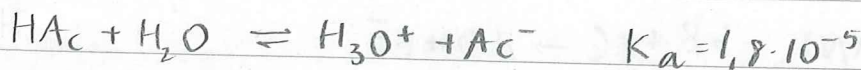
^ vatten är rent

$K_a = K \cdot [\text{H}_2\text{O}]$  kallas för **syrakonstanten**



$$K = \frac{\left(\frac{[\text{Na}^+]}{c_0}\right) \left(\frac{[\text{Cl}^-]}{c_0}\right)}{1 \cdot 1} = K_{sp} \quad \text{lösningssprodukt}$$

⇒ Koncentrationer vid jämvikt



från början  $c_0$

vid jämvikt  $c_0 - x$        $x$        $x$

$$K_a = \frac{\left(\frac{x}{c_0}\right) \left(\frac{x}{c_0}\right)}{\frac{c_0 - x}{c_0}} = 1,8 \cdot 10^{-5} \quad \Rightarrow \text{Ekvation för jämviktskoncentration}$$

⇒ lös andragsgradsekvationen :  $x = 0,0013 \text{ M}$

VID JÄMVIKT:  $[\text{HAc}]_{eq} = 0,0987 \text{ M}$

$[\text{Ac}^-]_{eq} = [\text{H}_3\text{O}^+]_{eq} = 0,0013 \text{ M}$

⇒ startkoncentrationer anger åt vilket håll reaktionen är spontan

⇒ Jämvikt är när entropin blivit så stor som möjligt

$$\Delta S_{\text{tot}} = \Delta S_{\text{sur}} + \Delta S_{\text{sys}} \geq 0 \text{ för spontan reaktion.}$$

⇒ gdrät det till där  $S_{\text{tot}}$  söker och avstannar när  $S_{\text{tot}}$  är MAXIMAL.

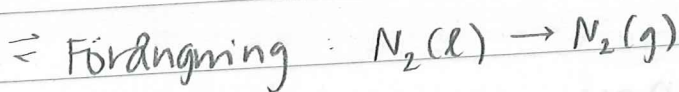
⇒ Vi räknar med Gibbs energi ⇒ hur mycket arbete som man maximalt kan få ut av reaktionen.

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \leq 0 \text{ för spontan reaktion.}$$

$$\Delta G = \Delta U - (p\Delta V) - T\Delta S \quad p \text{ och } T \text{ konstanta}$$

↑                    ↑                    ↑  
förändring    volym.s-    värme  
i mol. energi    ändring

$$-W = W' \leq \Delta G_r$$



$$\Delta G_r = G_f - G_i = G(\text{produkter}) - G(\text{reaktanter})$$

VÄTSKA

GAS

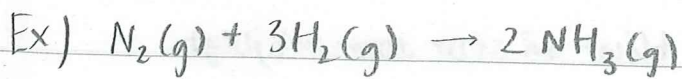
$$G(l) = G^\circ(l)$$

$$G(g) = G^\circ(g) + RT \ln \left( \frac{p_{N_2}}{p^\circ} \right)$$

↑ inget koncentrationsberoende i fri energi hos vätskor & fasta ämnen

$$\Delta G_r = G^\circ(g) + RT \ln \frac{p_{N_2}}{p^\circ} - G^\circ(l) = \Delta G_r^\circ + RT \ln \left( \frac{p_{N_2}}{p^\circ} \right)$$

↑  
 $G^\circ(g) - G^\circ(l)$



$$\begin{aligned} \Delta G_r &= 2 \cdot G(NH_3) - 1 \cdot G(N_2) - 3 \cdot G(H_2) = \\ &= 2 \left[ G^\circ(NH_3) + RT \ln \left( \frac{P_{NH_3}}{p^\circ} \right) \right] - \left[ G^\circ(N_2) + RT \ln \left( \frac{P_{N_2}}{p^\circ} \right) \right] - \\ &\quad - 3 \left[ G^\circ(H_2) + RT \ln \left( \frac{P_{H_2}}{p^\circ} \right) \right] = \\ &= \underbrace{2G^\circ(NH_3) - G^\circ(N_2) - 3G^\circ(H_2)} + RT \ln \left( \frac{P_{NH_3}}{p^\circ} \right)^2 - RT \ln \left( \frac{P_{N_2}}{p^\circ} \right)^1 - RT \ln \left( \frac{P_{H_2}}{p^\circ} \right)^3 = \end{aligned}$$

$$= \Delta G_r^\circ + RT \ln \left( \frac{\left( \frac{P_{NH_3}}{p^\circ} \right)^2}{\left( \frac{P_{N_2}}{p^\circ} \right) \left( \frac{P_{H_2}}{p^\circ} \right)^3} \right) = \Delta G_r^\circ + RT \ln Q = \Delta G_r$$

reaktionskvot Q

FALL 1:  $p_{N_2} = p_{H_2} = p_{NH_3} = 1 \text{ bar}$  (normaltillstånd)

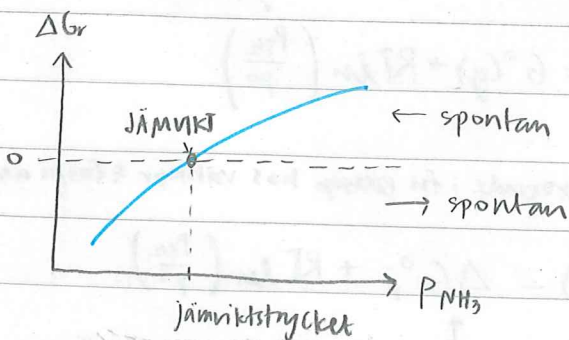
$$\Delta G_r = \Delta G_r^\circ + RT \ln \frac{\left( \frac{p^\circ}{p^\circ} \right)^2}{\left( \frac{p^\circ}{p^\circ} \right) \left( \frac{p^\circ}{p^\circ} \right)^3} = \Delta G_r^\circ$$

FALL 2:  $p_{N_2} = 0,92 \text{ bar}$   $p_{H_2} = 0,46 \text{ bar}$   $p_{NH_3} = 1,62 \text{ bar}$

$$\Delta G_r = -24,6 \text{ kJ/mol}$$

FALL 3:  $p_{N_2} = 0,86 \text{ bar}$   $p_{H_2} = 0,01 \text{ bar}$   $p_{NH_3} = 2,13 \text{ bar}$

$\Delta G_r = +3,25 \text{ kJ/mol} \Rightarrow$  bakåtraktionen är spontan



$\Rightarrow \Delta G_r$  för allmän reaktion

$$\Delta G_r = \sum n G_m(\text{produkter}) - \sum n G_m(\text{reaktanter})$$

↑  
molär  $\Rightarrow$  per mol reaktant/produkt

$$G_m(J) = G_m^\circ + RT \ln a_j$$

GASER:  $G_m(J) = G_m^\circ + RT \ln \frac{P}{P^\circ}$   $a_j = \frac{P}{P^\circ}$

UPPLÖSTÄMNE:  $G_m(J) = G_m^\circ + RT \ln \frac{[J]}{c^\circ}$   $a_j = \frac{[J]}{c^\circ}$

RENT FAST / FLYTANDE:  $G_m(J) = G_m^\circ + RT \ln 1 = G_m^\circ$   $a_j = 1$



$$Q = \frac{a_D^d a_E^e}{a_B^b a_C^c}$$

GER

$$\Delta G_r = \Delta G_r^\circ + RT \ln Q$$

$\Rightarrow$  Vid jämvikt:  $\Delta G_r = 0$

$$0 = \Delta G_r^\circ + RT \ln Q_{eq}$$

← reaktionskvoten vid jämviktsskoncentrationer  
 $K =$  jämviktskonstanten

$$\Delta G_r^\circ = -RT \ln K \Rightarrow K = e^{-\frac{\Delta G_r^\circ}{RT}}$$

OBS! P och [J] behöver inte vara de som råder vid jämvikt.

⇒ Reaktionsriktning

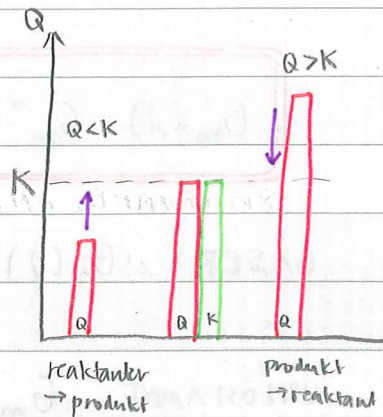
$$\Delta G_r = \Delta G_r^\circ + RT \ln Q = -RT \ln K + RT \ln Q = RT \ln \frac{Q}{K}$$

FALL 1:  $Q < K \Rightarrow \frac{Q}{K} < 1 \Rightarrow \Delta G_r < 0$

FALL 2:  $Q > K \Rightarrow \frac{Q}{K} > 1 \Rightarrow \Delta G_r > 0$

FALL 3:  $Q = K \Rightarrow \frac{Q}{K} = 1 \Rightarrow \Delta G_r = 0$

↑  
aktuella koncentrationer



⇒ Chateliers princip: Om man stör jämvikten kommer reaktionen gå åt det håll som återställer jämvikten.

## ⇒ JÄMVIKTSKONSTANTEN

- berättar åt vilket håll reaktionen går.

- 3 sätt att få fram värde på K

①

$$K = e^{-\Delta G_r^\circ / RT}$$

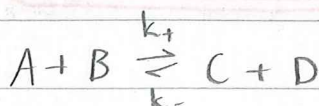
$\Delta G_r^\circ$  fås från tabell:  $\Delta G_r^\circ = \Delta H_r^\circ - T\Delta S_r^\circ$

②

$$K = \left( \frac{[\text{produkter}]}{[\text{reaktanter}]} \right)_{eq}$$

③

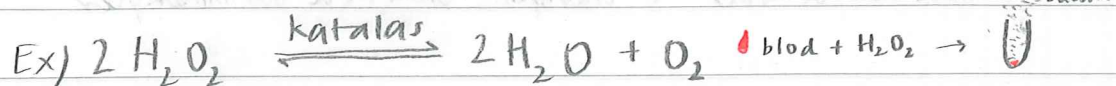
$$K = \frac{k_+}{k_-}$$





# BIOKEMI 3 Enzymer

- Biokatalysatorer: hjälper till med reaktioner i cellen.



⇒ minskar  $E_a$  så att jämvikten inställer sig snabbare, dvs. hastigheten ökar för reaktion med  $\Delta G < 0$ .

- Kopplade reaktioner: energi- och elektronbärare

## ENZYMER

✚ Specifik mot viss typ av reaktion ⇒ enzymaktivitet.

✚ Specifika och fungerar under specifika reaktionsförhållanden

✚ Cellens reaktioner påverkas till största del av enzymer.

✚ Enzymer är proteiner, RNA undantag

Reglerad av olika molekyler

✚ Klassificeras i sex grupper beroende på vilken reaktion de katalyserar

## Klassificeringsgrupper:

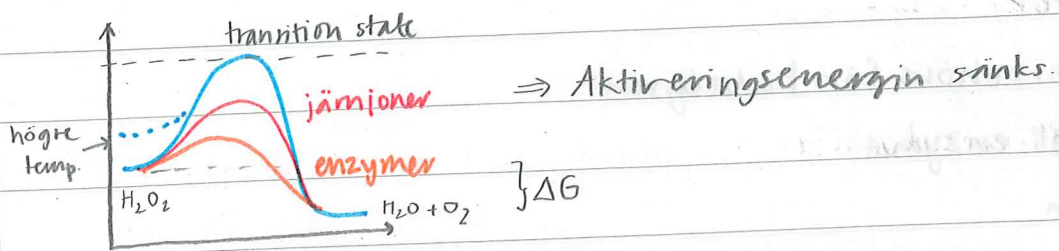
1. Oxidoreduktas:  $e^-$ -transport, ox. & red. av molekyler
2. Transferas: transport av funktionella grupper
3. Hydrolas: hydrolytiska reaktioner, sönderdelning mha  $H_2O$
4. Lyas: sönderdelning utan  $H_2O$
5. Isomeras: transformation av en isomer till en annan
6. Ligas: ligering av molekyler

## Tillämpning av enzymer

- tekniska applikationer: processer blir milda, miljövänliga och energieffektiva
- bulkkemikalier: tvättmedel, bakning, ölbygging, papperstillverkning
- finkemikalier: diagnostik, molekylärbiologi, analys

## Enzymer i cellen

- ⊙ Biokemiska reaktioner är ordnade i metabola vägar som är katalyserade av enzymer  $\Rightarrow$  REGLERING



## Transition state

- Omlagning av molekylstrukturen.
- Övergångsform mellan substrat & produkt
- Instabil.
- Enzymer stabiliserar transition state-formen, dvs. det krävs mindre energi för att molekylerna ska hålla denna form.

## Mekanismer

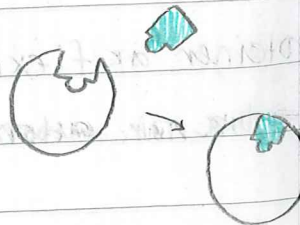
- Molekyler, **ligander**, kan binda till enzymets yta (intermol. bindningar)
- **Aktivt säte** - binder substrat/produkt och medger katalys.
- **Regulatoriska säten** kan binda **effektorer** som ökar/minskar aktiviteten

Bindningar: väte- & jonbindningar och hydrofob interaktion

⇒ substratet hålls i transition state

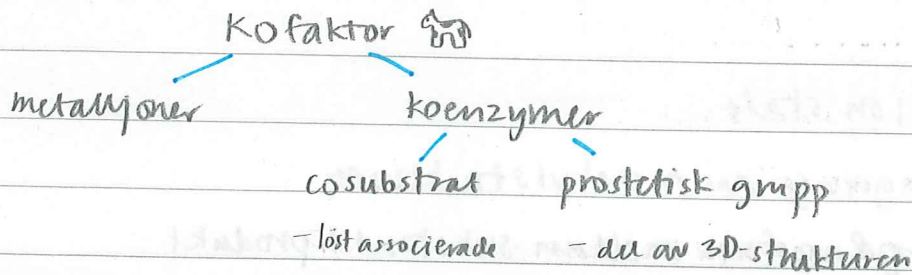
⇒ substratet positioneras så att andra molekyler/substrat kan reagera, t.ex. vatten vid en hydrolys (kosubstrat).

Formen på det aktiva sätet ger specificitet



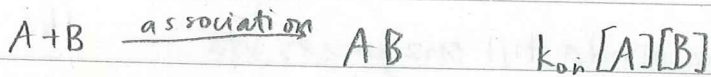
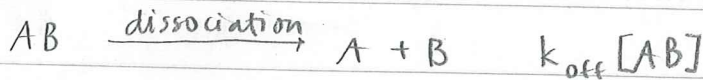
## Kofaktorer

- grupp som behövs för katalysen
- bundet till enzymet
- koenzym



- Vitaminer hjälper kroppens reaktioner  $\Rightarrow$  viktigt att äta!

## INBINDNING



$\Rightarrow$  Jämviktskonstanten är ett mått på hur stark inbindningen är:

$\Rightarrow$  Inbindning måste vara lagom stark så att 1) reaktionen kan ske och 2) ämnena släpper efter reaktionen.

- Irreversibel inbindning: binder kovalent till det aktiva sätet och förstör enzymaktiviteten.

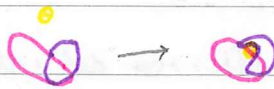
Ex) sarin (nervegas)

- Proteiner är flexibla  $\Rightarrow$  kan ändra form.

$\Rightarrow$  bra när substratet binds in och man vill behålla transition state.

- Konformationsändring: enzym byter form

Ex) Hexokinas

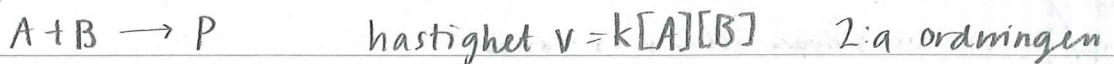
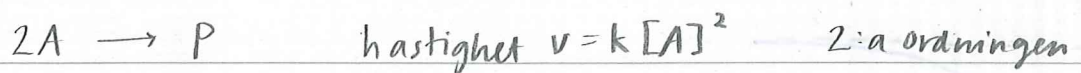
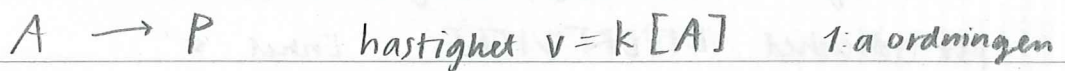


## ENZYMKATALYS

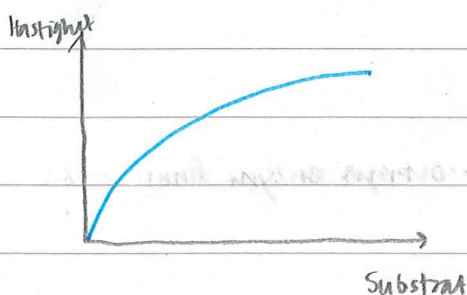
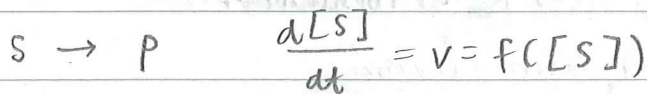
### Enzymmekanismer

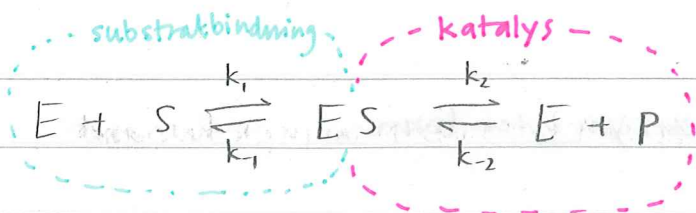
- aktivt säte
- andradelar stabiliserar strukturen
- kan interagera med andra cellulära beståndsdelar, ex) transportprotein
- I aktiva sätet finns sura, basiska & nukleofila grupper.
- Kofaktor & koenzym: hjälpmolekyler och joner
- Vatten kan vara exkluderat från det aktiva sätet.

## KINETIK



## ENZYMKINETIK





- reaktion<sub>-2</sub> är mycket liten eftersom det inte finns (allt finns lite) P.
- [ES] är konstant  $\rightarrow k_{-2}$  är liten
- $\Rightarrow$  Antaganden

Michaelis-Mentens ekvation

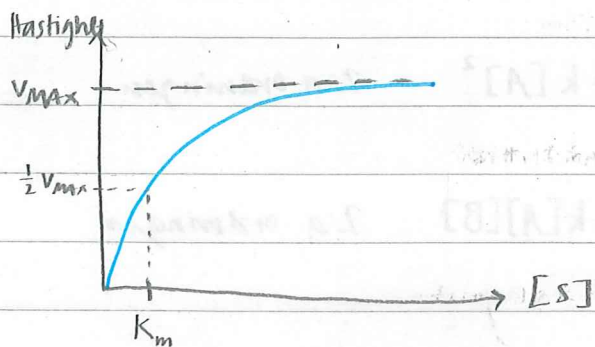
$$v = V_{\max} \frac{[S]}{[S] + K_m}$$

$$K_m = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1}$$

$V_{\max}$  = maximala hastigheten

Turnover number:  $k_{\text{cat}} = \frac{V_{\max}}{[E_{\text{tot}}]} = k_2$

$\Rightarrow$  hur många substratmolekyler enzymet kan omvandla per tidsenhet: EFFEKTIVITET. Enhet:  $s^{-1}$



$$\lim_{S \rightarrow \infty} V_{\max} \frac{[S]}{[S] + K_m} = V_{\max} \rightarrow K_m \text{ är försumbart}$$

$$s = K_m : v = \frac{K_m}{K_m + K_m} \cdot V_{\max} = \frac{1}{2} V_{\max}$$

- Gäller för de allra flesta enzymer, för övriga enzym finns mer komplicerade samband.

-  $V_{max}$ : mättnad av bindningssätet  $\Rightarrow$  högsta möjliga hastighet

-  $K_m$ : enzymets affinitet mot substratet.

Lågt värde på  $K_m \Rightarrow$  effektivt enzym.

Kan bero på temp  $\uparrow$ , pH  $\uparrow/\downarrow$ , jonstyrkt  $\uparrow$ , substrat

SI-enhet: **katal** = 1 mol/s

Vanlig enhet: U (units) = 1  $\mu$ mol/min

1U = 16,67 nanokatal

Bestämning av  $V_{max}$  och  $K_m$

- Linjärisering av MM-ekvation och linjär regression

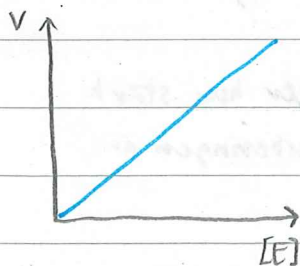
- Lineweaver-Burk:  $\frac{1}{v} = \frac{1}{v_{max}} \cdot \frac{K_m + [S]}{[S]} = \underbrace{\frac{K_m}{v_{max}}}_{\text{Lutning}} \frac{1}{[S]} + \frac{1}{v_{max}}$

- Eadie-Hofstee:  $v = f\left(\frac{v}{[S]}\right)$

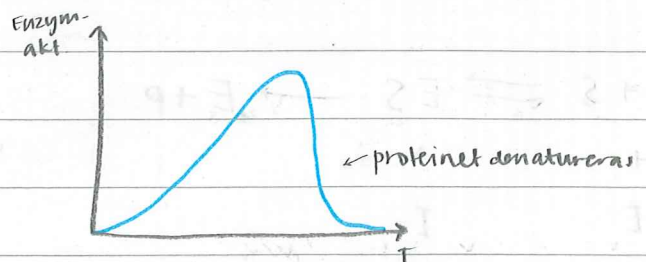
/ Idag: använd icke-linjär regression

Faktorer som påverkar enzymaktivitet

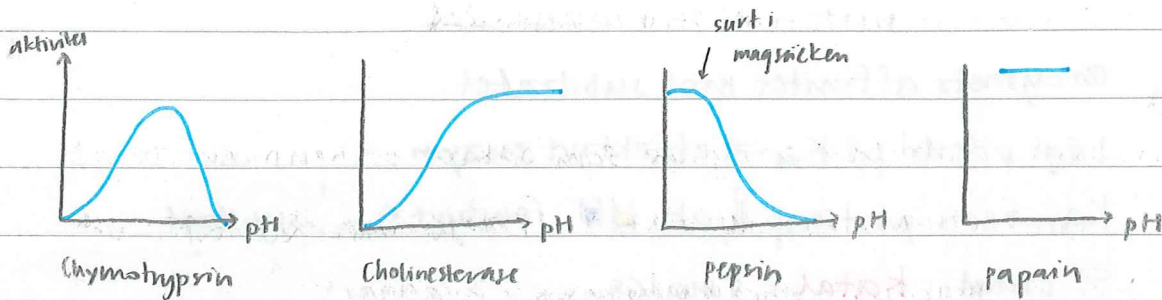
Enzymmängd



Temperatur



pH



## REGLERING

- inbindning av molekyl / effektor
  - ⇒ öka aktivitet med **aktivator**
  - ⇒ minska aktivitet med **inhibitor**
- modifiering med kovalent bundengrupp
  - ⇒ fosforylering, metylering
  - ⇒ utanför det aktiva sätet
- öka produktionen av enzymet ⇒ högre hastighet
- öka nedbrytningen av enzymet

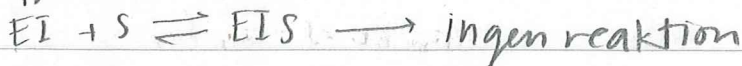
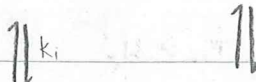
Inhibering: • minskning av den enzymatiska aktiviteten

- **inhibitor** binder till aktivt eller reglerande säte
- produkt eller annan molekyl
- viktig för många läkemedel



+                    +

I                    I



$K_i$  säger hur stark  
inhiberingen är



- Sjukdomar beror ofta på för stor enzymtillverkning  
 → använder inhibitorer som läkemedel.

- Penicillin: inhiberar enzymer som bakterier behöver för att bilda sina cellväggar (tvärbundna med socker och protein ⇒ starka bindningar & väggar)

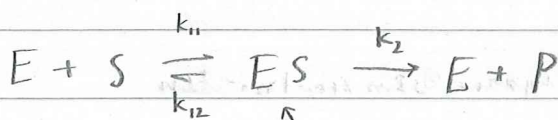
Resistenta bakterier klipper upp penicillin-molekylen så att denna inte fungerar.

- Ämnen som liknar transition state kan inhibera det aktiva sätet: **transition state-analoger**  
 ⇒ bra för läkemedel - hämmar enzymbildning

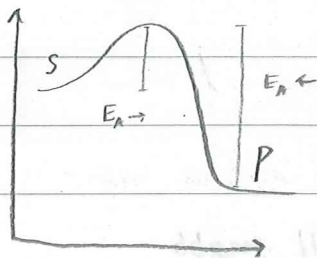
26/11

Björn

## KINETIKUPPGIFT



↑ löst sammansatt ⇒ kan dissociera



$$u_1 = [E]$$

$$u_2 = [S]$$

$$u_3 = [ES]$$

$$u_4 = [P]$$

Elementära hastighetsreaktioner:  $r_{11} = k_{11} [E][S] = k_{11} u_1 u_2$

$$r_{12} = k_{12} [ES] = k_{12} u_3$$

$$r_2 = k_2 [ES] = k_2 u_3$$

Differentialekv:

$$u_1 = \frac{d[LE]}{dt} = -r_{11} + r_{12} + r_2$$

$$u_2 = \frac{d[S]}{dt} = -r_{11} + r_{12}$$

$$u_3 = \frac{d[ES]}{dt} = r_{11} - r_{12} - r_2$$

$$u_4 = \frac{d[P]}{dt} = r_2$$

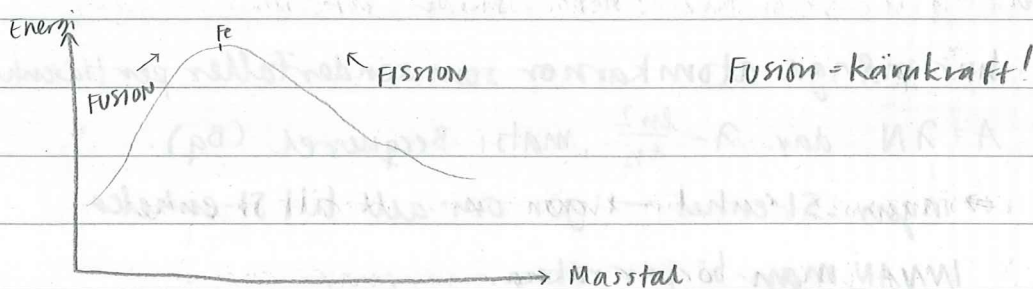
⇒ 4 kopplade differentialekvationer.


# KÄRNKEMI

2/12

- Vid inandning av uran krävs man innan radioaktiviteten gör sig påmind.
- Tillverka kärnbränsle: vill ha Uran-235 som är mycket radioaktivt, kvar blir Uran-238 som är mindre radioaktivt.
- 1879 upptäcks radioaktiv strålning
- Röntgen, Becquerel, Pierre & Marie Curie bidrog till snabb utveckling av kärnkemin.
- Marie Curie bestrålade fransmännen med radiumstrålning under första världskriget så att de skulle bli mer motståndskraftiga.

- Hög andel kvinnor inom kärnkemin, bl.a. Lise Meitner och Marie Curie. ↳ Kungälv!
- Under 1940-talet forskades det mycket på bomber.
- Atom: kärna +  $e^-$   
Kärnan: protoner & neutroner  
Grundämne anges av antal  $p^+$   $\Rightarrow$  olika  $n$  ger isotoper
- Bestämt antal neutroner: nuklid
- Radionuklid: radioaktiv nuklid, tex. Ce-137
- Bindningsenergi: blir en massdefekt när kärnan bildas och energi frigörs.



DEMO:  detektor

Plutonium - stoppas med papper

strontium - stoppas med hand

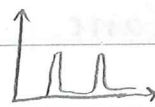
annan metall - stoppas med bly

$\Rightarrow$  olika typer av strålning!

- Joniserande strålning.

$\alpha$ -strålning: He-kärna:  $2p^+ + 2n$

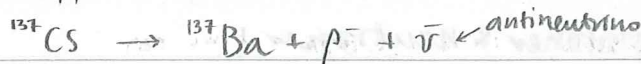
Stoppas av papper, plast.



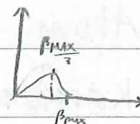
$\beta$ -strålning:  $e^-$  med hög energi

Räckvidd: luft 10m, värmad 1cm

Stoppas med hand



tar  $\frac{2}{3}$  av sönderfallsenergin



$\gamma$ -strålning: elektromagnetisk strålning

Sänds aldrig ut ensam  $\Rightarrow$  följer  $\alpha$ ,  $\beta$  eller neutron

Räckvidd avtar exponentiellt  $\Rightarrow$  när aldrig 0.

Stoppas av 5-10 cm bly eller 25-50 cm betong.

- Strålningen stoppas när energin absorberas  $\Rightarrow$   $\beta$ -strålning är ingenting man vill ha att göra med.

- Aktivitet: hur många atomkärnor som sönderfaller per tidsenhet

$$A = \lambda N \quad \text{där } \lambda = \frac{\ln 2}{t_{1/2}}, \text{ mäts i Becquerel (Bq).}$$

$\Rightarrow$  ingen SI-enhet  $\rightarrow$  gör om allt till SI-enheter

INNAN man börjar räkna.

- Halveringstid: tiden det tar för hälften av atomkärnorna att sönderfalla.

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \approx \frac{0,693}{\lambda} \quad \text{där } \lambda \text{ är hastighetskonstanten}$$

- Nuklidkarta: Neutroner mot protoner  $\Rightarrow$  gult =  $\alpha$ , grönt =  $\beta^-$ , rött =  $\beta^+$ ,

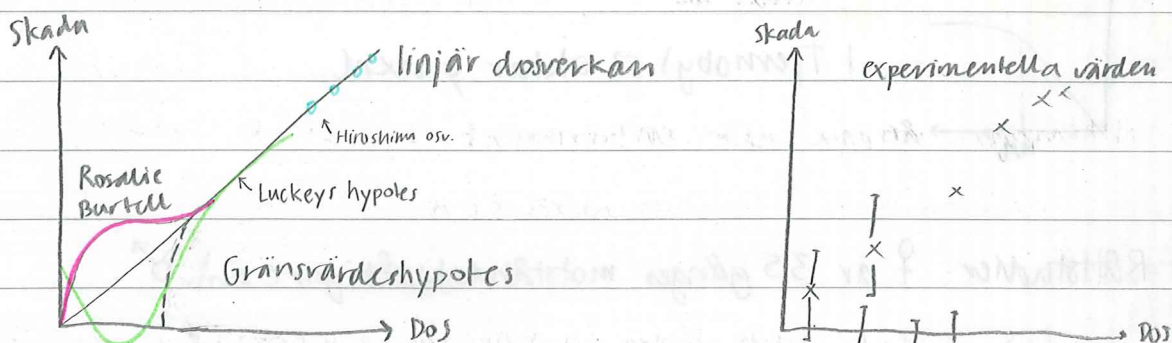
svart = stabilt.  $\beta^- \Rightarrow N \rightarrow P^+$ ,  $\beta^+ \Rightarrow P^+ \rightarrow N$

- 100 blyatomer väger inte lika mycket i Oslo som i Göteborg  
→ i Göteborg: Pb-236, i Oslo: Pb-238, dvs. lite tyngre.

- Radioaktivitet smittar inte ⇒ kontaminerar om ämnet hamnar på något annat.

- Absorberad dos: 1 Gray (Gy) = 1 J/kg  
absorberad strålningsdos per massenhet.

- Avståndslagen: strålningen minskar med kvadraten på avståndet.



⇒ korrelationsanalys dödar vetenskapen!

Ex) Enkät med veg & köttätare om depression


⇒ deprimerad av att inte äta kött...

- Människan är van vid en högre strålningsmängd än vad vi har idag.

- Biologisk effekt: 1) växelverkan med biomolekyler  
2) växelverkan med vatten och bildar radikaler som orsakar skada hos biomolekyler.

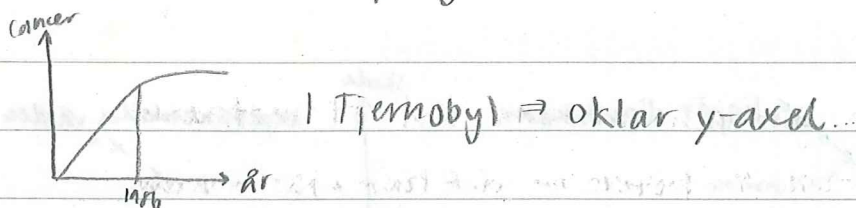
- Sievert:  $H_R = \sum_R w_R D_{T,R}$  och  $H_C = \sum_T w_T H_T$

- Kroppen är mest känslig för strålning i fortplantningsorganen  
⇒ optimalt att ha mobilen i en benficka eller i pannband.

-  Mikrovågsugnar är inte farliga på utsidan ⇒ insidan är anpassad för att få vattenmolekyler att vibrera.

- Latenttiden för cancer är 20-30 år.

- OBS! Läs axlarna på grafer



Pandoras promise  
⇒ propaganda film

- Rättstudier: ♀ är 3,5 gånger motståndskraftigare än ♂.

- Om man utsätts för 6-20 Sv så dör man inom 2 veckor.  
⇒ Mag- & tarmkanalen kollapsar, vätskeförlust pga förstört tarmepitel.

- Finns mycket uran i berggrunden i Göteborg.

- ALI: annual limited intake - årligt intag av radionuklid som motsvarar en årlig dos av 20 mSv.

- ALARA: as low as reasonable achievable ⇒ hålla sig så lågt man kan tänka sig.

## - Naturlig strålning

• Kosmisk strålning: solen & rymden

• Markens uran & thorium

•  $^{40}\text{K}$  från kroppen, nerver & muskler

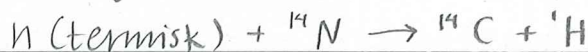
• Radon från luften

- För att få så lite strålning som möjligt från en partner ska man välja en lönnfet klen rackare


- Bestrålad mat är inte farlig ur radioaktiv synpunkt. Däremot kan radikaler göra att ämnen i maten farliga.

- Bestämna ålder på gamla saker mha kol-14-metoden

⇒ idag finns mer kol-14 i luften än det har gjort innan



↑ långsam

-  Kärnkraftsreaktor: fungerar som en stor vattenkokare

(kokreaktor). Finns även tryckvattenreaktor → överhettat

vatten driver processen. Termisk verkningsgrad: 30%

- Idag är verkningsgraden LÅG, lite av uranens energi används, ca 1%. Eftersom uranen kommer ta slut så smältning om behöver man kunna utnyttja all energi.

- Hårdsmälta:  $\text{Zr} + 4\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Zr}(\text{OH})_4 + \text{H}_2 + \text{energi}$

Vid  $850^\circ\text{C}$  antänds vätgasen och det exploderar.

→ Media är inkompetenta...


# SYROR & BASER

6/12



Jerker

vill förstå vad som händer på vägen

- Kuriosa: senapsgas används idag som cancerläkemedel.
- Alkohol + karboxylsyra  $\rightarrow$  ester  
 $\rightarrow$  utnyttjas när man gör om rapsolja till tvål eller biodiesel.
- Termodynamiskt gynnsamt att gå från cellulosa till koldioxid och vatten. Trots detta sker inte reaktionen alltid momentant.
- All kemi handlar om elektroners rörelse 
- Kemisk drivkraft: Gibbs fria energi.

## JÄMVIKTLÄRA

- ▷ Termodynamiskt: genomförbarhet
- ▷ Reaktionsmekanism: serie av elementarsteg
- ▷ Transition state: övergångstillstånd

## BRØNSTEDT



proton-  
acceptör

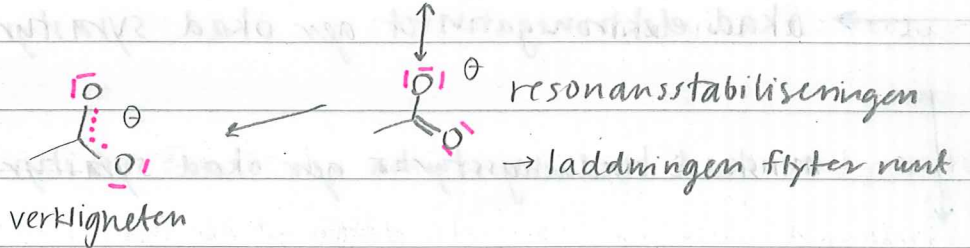
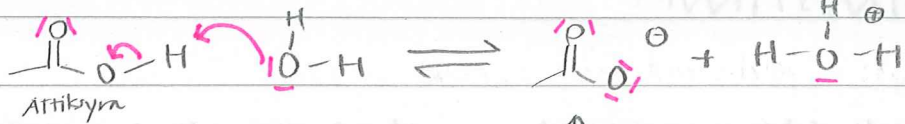
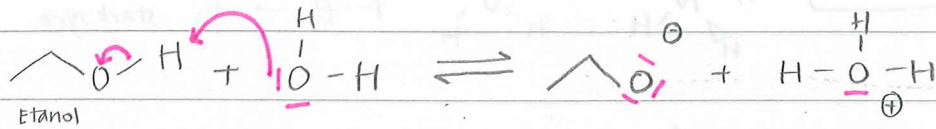
proton-  
donator

konjugerad  
syra

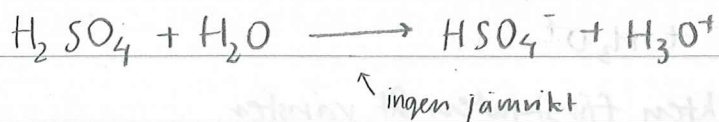
- Jämvikten förskjuten mot den svagare syran & svagare basen.



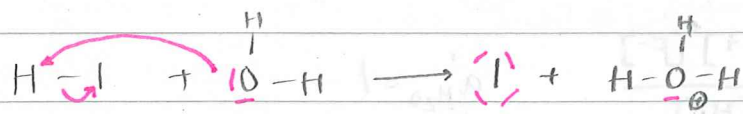
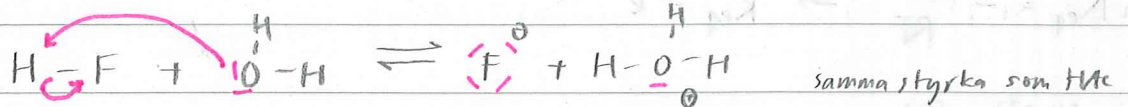
- ° Svag bas: stabil trots fria elektron par.  
 hög EN hos atomen med fritt e<sup>-</sup> par  
 resonansstabilisering



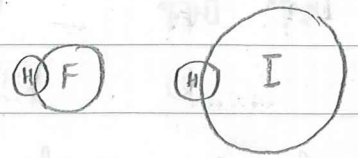
- ° Stark syra: Den protonerade formen av en svag bas  
 Fullständigt deprotonerad i vatten

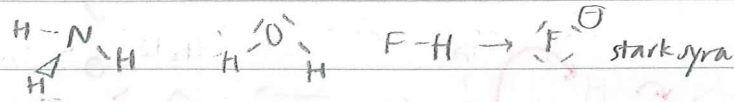
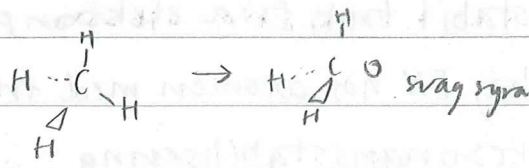
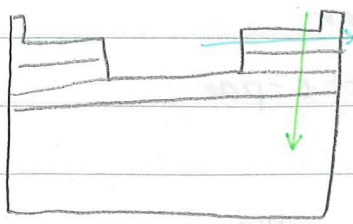


Starkaste syran man kan ha i vatten är H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> ⇒ alla starkare syror bildar H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>. Således är starkaste basen OH<sup>-</sup>.



- Låg bindningsstyrka ger stark syra





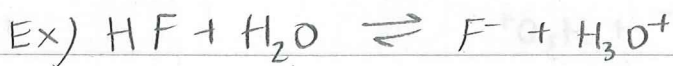
## JÄMFÖRA SYRASTYRKA

→ ökad elektronegativitet ger ökad syrastyrka

↓ minskad bindningsstyrka ger ökad syrastyrka

svag syra → stark bas  
stark syra → svag bas

konjugerade syra-baser



$\Delta G > 0$  dvs. jämvikten förskjuten åt vänster.

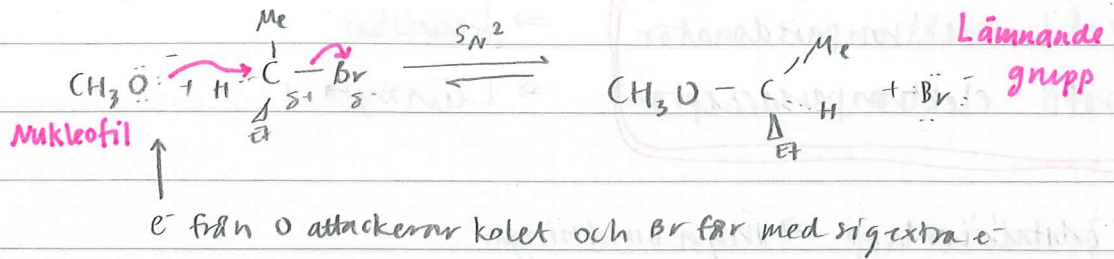
## FORMLER

$$\ln K_{eq} = -\frac{\Delta G^\circ}{RT} \Rightarrow K_{eq} = e^{-\frac{\Delta G^\circ}{RT}}$$

$$K_c = \frac{\frac{[\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{H}_3\text{O}^+]^\circ} \cdot \frac{[\text{F}^-]}{[\text{F}^-]^\circ}}{\frac{[\text{H}_2\text{O}]}{[\text{H}_2\text{O}]^\circ} \cdot \frac{[\text{HF}]}{[\text{HF}]^\circ}} = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{F}^-]}{[\text{HF}]} \quad a_{\text{H}_2\text{O}} = 1$$

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

# SUBSTITUTIONSREAKTIONER



OBS! Visa ALDRIG hur atomer flyttar sig med krokiga pilar.

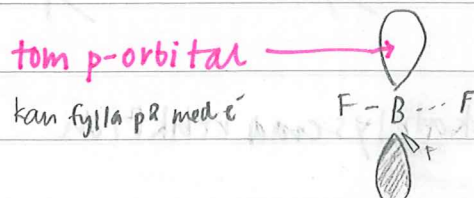
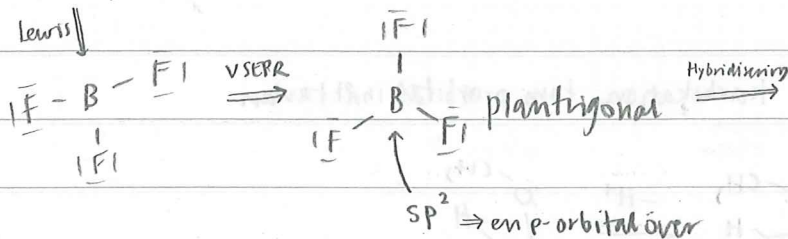
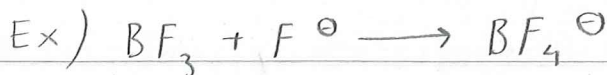
- $\circ$   $\text{S}_\text{N}^2$ : S står för substitution  
 N står för nukleofil  
 2 står för bimolekylär (kinetik)

$\circ$  Nästan alla Brønstedtreaktioner är  $\text{S}_\text{N}^2$ -reaktioner.

## LEWIS SYRA-BAS-TEORI

Lewis-syra: elektronparsacceptor

Lewisbas: elektronpardonator



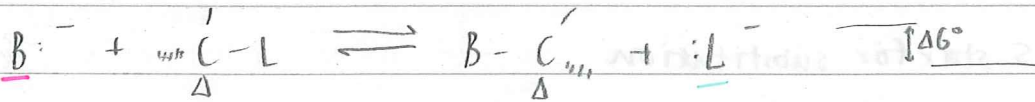
◦ Det måste alltid finnas en tom orbital som kan ta hand om e<sup>-</sup>.

nukleofil: elektronparsdonator ⇒ Lewisbas

elektrofil: elektronparacceptor ⇒ Lewissyra

◦ Inget orbitalöverlapp ⇒ Inga bindningar.

### Nukleofil substitution

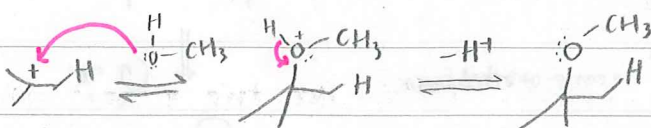
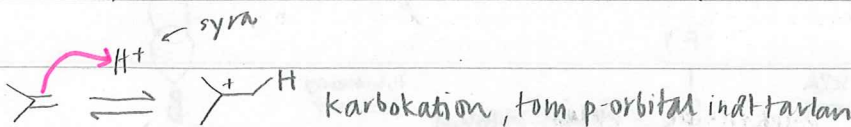
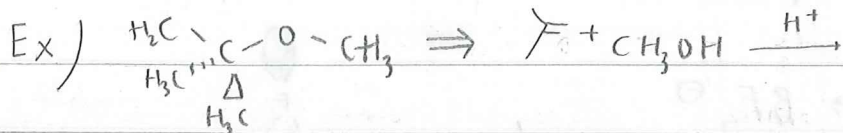


Lämnande gruppen: så svag bas som möjligt

Nukleofil: så stark bas som möjligt

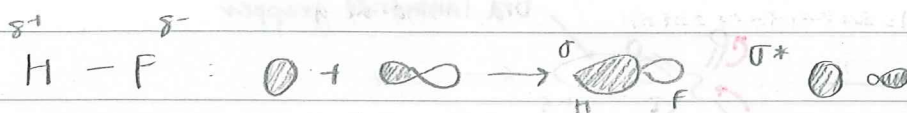
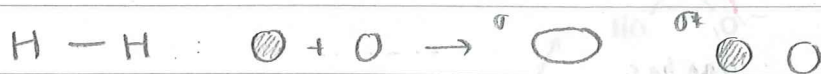
⇒ uppnå så stor drivkraft som möjligt.

Från stark → svag: finns energi i starka syror som avges så att syrorna inte har överskott på energi.

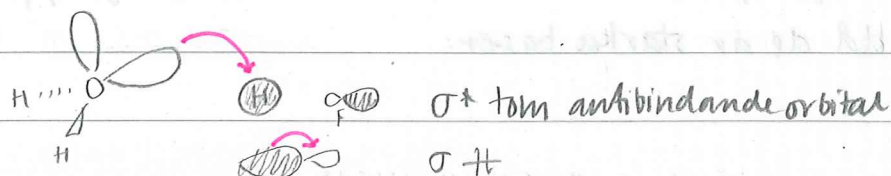
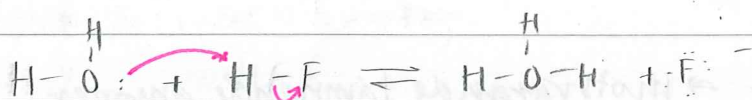


⇒ syrakatalyserad reaktion

## Polar kovalent bindning

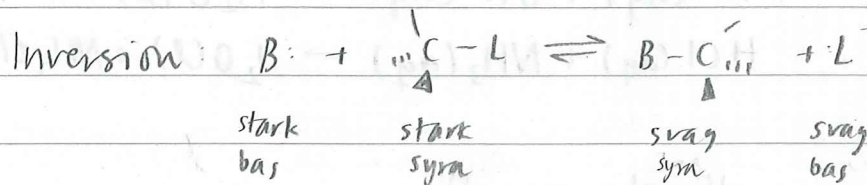


F är mer elektronegativt  $\rightarrow$  tar mer p-orbital till molekylorbitalen.



När tomma orbital (antibindande orbital) fylls, minskar bindingsstalet  $\Rightarrow$  bryter H-F-bindingen.

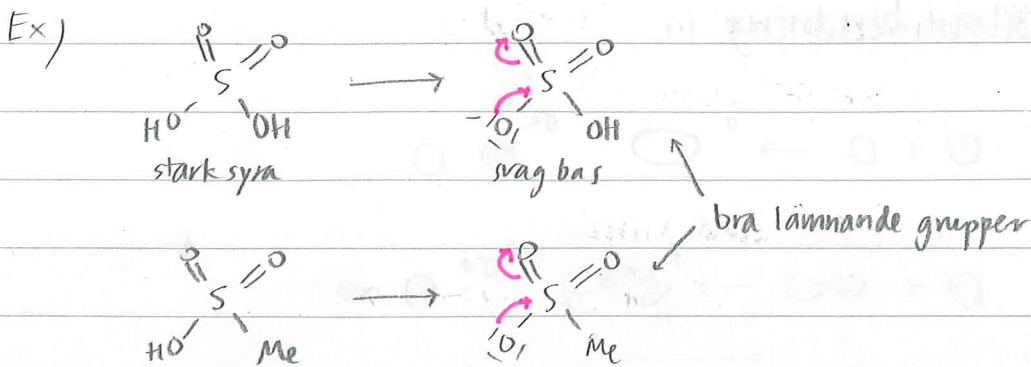
Tomma orbital kan bara fyllas på vissa sätt  $\Rightarrow$  en orbital med e<sup>-</sup> måste kunna överlappa med en tom orbital för att det ska bli en bindning.



$\Rightarrow$  "paraplyet vänds"

- Mycket N i nukleotider i kroppen. Dessa har fria e<sup>-</sup> par och fungerar som Lewisbaser.

O.F = Hg



⇒ kortsluter DNA med dessa grupper och dödar cancer.

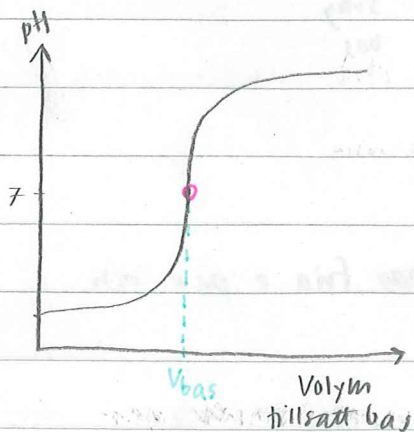
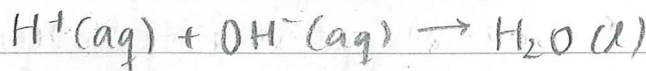
- Alkohol är svaga syror ⇒ motsvarande lämnande grupper är dåliga då de är starka baser.

# SYROR & BASER del 2

9/12  
Ulf

## TITRERING

Titrerreaktion: stark syra med stark bas



Vi vet:  $c_{\text{bas}}, V_{\text{syra}}$

Vi sätter till:  $V_{\text{bas}}$

$$c_{\text{syra}} = \frac{c_{\text{bas}} V_{\text{bas}}}{V_{\text{syra}}}$$

Vid titrerpunkten:  $n_{\text{OH}^- \text{tillsatt}} = n_{\text{H}^+ \text{lösning}}$

pH = 7,0 för stark syra/stark bas-reaktion