

Kemi och biokemi för K, Kf och Bt  
2012

## Föreläsning 2.1

Termodynamikens första huvudsats

Björn Åkerman  
Kemi och biokemi  
Chalmers

### Meddelande angående Lp2

Håll koll på hemsidan! Det finns en app.

#### Reviderad gruppindelning för labbarna.

Säg till om du inte är med. Vore bra med flytt inom K.



#### Vardagsmolekyler.

Första Fö idag 15:15 i KE. Gruppindelning på hemsidan.

**Jonjakten.** Bara för K.

**Matteprojekt.** Lv5

#### Biokemin.

Udda läsveckor: Föreläsningar i GD. Första Fö 13:15 idag i GD  
Jämma läsveckor: Övningar + Inlämningsuppgifter. (+ två labbar i Lp3)

Obligatorisk för K och Bt. Kf anmäler sig enligt instruktioner på Anslagstavlan.  
Fyll i enkäten och om Ja registrera officiellt.

**Omduggan** rättad och rapporterad. Kom till mitt kontor om du vill granska.  
**Om-munta 2**

Reviderad gruppindelning

### Tre inlämningsuppgifter i kemi

#### Läs följande instruktioner noggrant

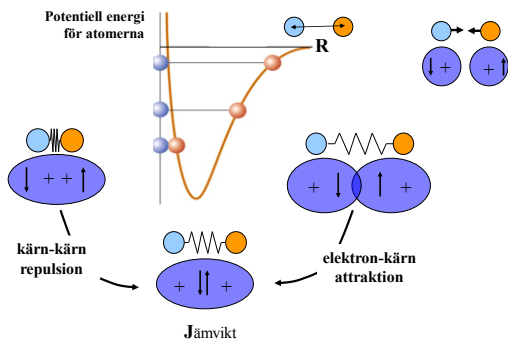
1. Inlämningsuppgifterna är obligatoriska, du måste bli godkänd. Du får en andra chans genom att svara på en eventuell retur.
2. Du får VG på uppgiften om den är rätt från början. Du får 1 bonuspoäng om du har VG på minst två av uppgifterna.
3. Uppgiftstexterna finns på Ping-pong. Den bakgrund du behöver ges på föreläsningarna i läsvecka 1, 2 respektive 3.
4. lämna din handskrivna lösning till din lektionslärare på tisdags-lektionen i den påföljande läsveckan (2, 3 respektive 4)
5. Om du får retur har du ytterligare en vecka på dig att leverera rätt svar till din lektionslärare.

Använd uppgifts-sidan som försätsblad.

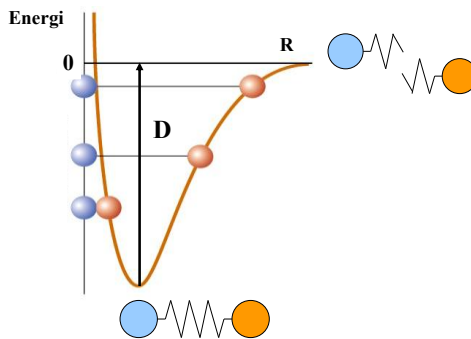
*Fyll i namn och grupp-tillhörighet på försätsbladet !*

### Läsperiod 1: Kemisk bindning

Atomerna dras till varandra och bildar molekyler



### Molekylens bindningsenergi



### Bollar och kemi

Fallande boll

Kemisk bindning

I båda fallen omvandlas en potentiell energi till värme i omgivningen

### En färgglad reaktion

$$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH} + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{??}$$

<http://michele.usc.edu/java/kinetics/simulator.html>

### Inför läsperiod 2: En typisk kemisk reaktion

$$\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$$

### Ammoniak-reaktionen

bindningar både bryts och bildas

$$\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$$

### Ammoniak-reaktionens energi-profil

$$\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$$

### Kemisk bindningarna i reaktionen

$$\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$$

$$:\text{N} \equiv \text{N}: + \text{H}-\text{H} \rightarrow \begin{matrix} \text{H} \\ | \\ \text{N} \\ | \\ \text{H} \end{matrix}$$

Bindningar bryts ...

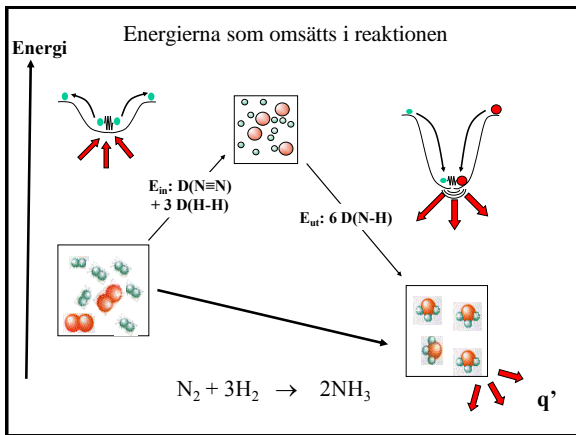
... och bildas

**TABLE 2.2** Bond Dissociation Energies of Diatomic Molecules (kJ·mol<sup>-1</sup>)

Molecule	Bond dissociation energy
H <sub>2</sub>	424
N <sub>2</sub>	932

**TABLE 2.3** Average Bond Dissociation Energies (kJ·mol<sup>-1</sup>)

Bond	Average bond dissociation energy	Bond	
C-H	412	C-I	238
C-C	348	N-H	388



### Tabellvärden på dissociationsenerier D

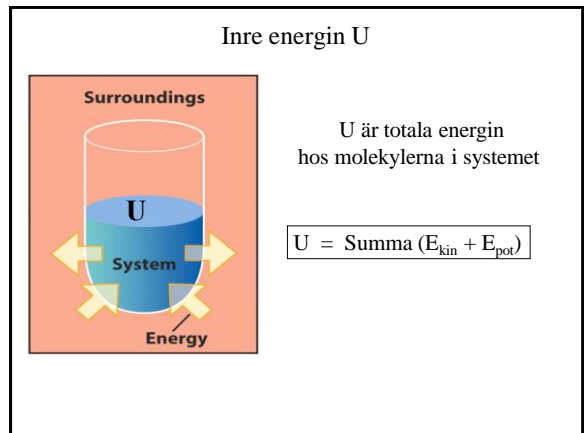
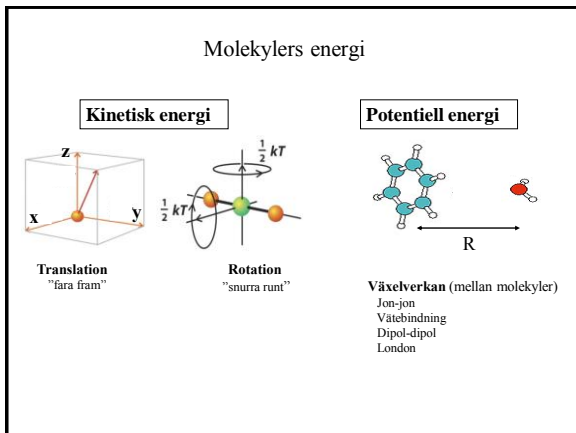
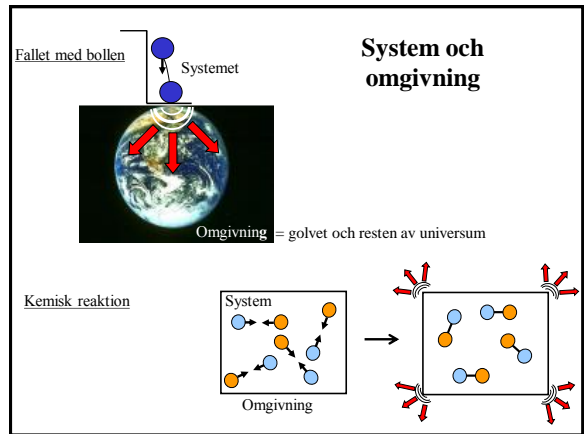
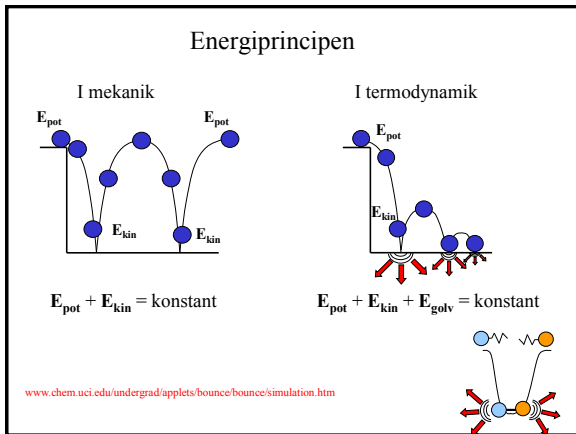
#### Diatomära molekyler

Molecule	Bond dissociation energy
H <sub>2</sub>	424
N <sub>2</sub>	932
O <sub>2</sub>	484
CO	1062
F <sub>2</sub>	146
Cl <sub>2</sub>	230
Br <sub>2</sub>	181
I <sub>2</sub>	139
HF	543
HCl	419
HBr	354
HI	287

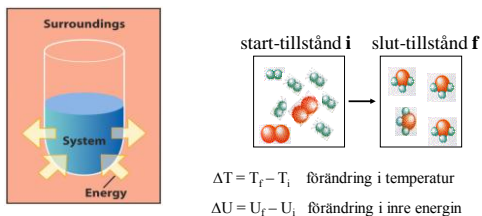
#### Enskilda bindningar i fleratomiga molekyler

Bond	Average bond dissociation energy	Bond	Average bond dissociation energy
C-H	412	C-I	238
C-C	348	N-H	388
C=C	612	N-N	163
C≡C*	518	N=N	409
C=C	837	N-O	210
C-O	360	N=O	630
C=O	743	N-F	195
C-N	305	N-Cl	381
C-F	484	O-H	463
C-Cl	338	O-O	157
C-Br	276		

**Medelvärden**



### Tillstånd, process och $\Delta$ -symbolen



#### Standardtillstånd

Gaser och rena ämnen:  $p = p^\circ = 1 \text{ bar}$   
 Upplöst ämne  $c = c^\circ = 1 \text{ M}$

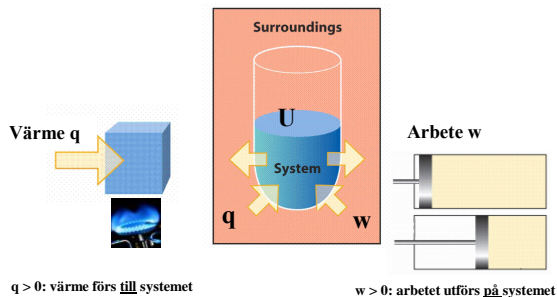
#### Processer

Isoterm  $T_f = T_i$   
 Isobar  $p_f = p_i$   
 Isokor  $V_f = V_i$   
 Adiabat inget värmeutbyte

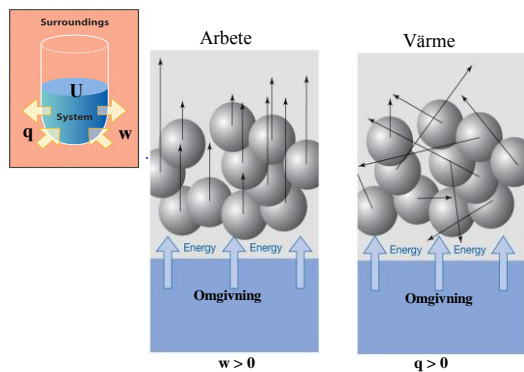
### Termodynamikens första huvudsats

Energiprincipen för system + omgivning

$$\Delta U = w + q$$

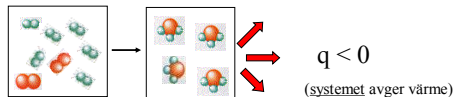


### Skilnaden på värme och arbete

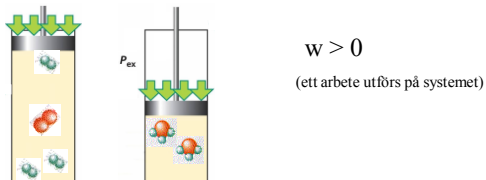


### Värme och arbete vid ammoniakreaktionen

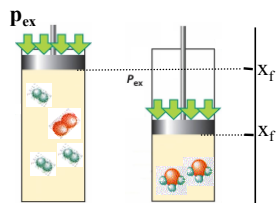
#### Värme: Exoterm reaktion



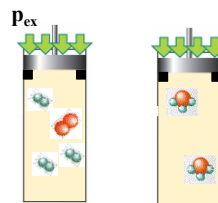
#### Arbete. Volymen minskar



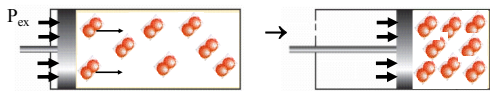
### Arbetet då reaktionen sker vid konstant tryck



### Arbetet då reaktionen sker vid konstant volym



### Arbetet om trycket inte är konstant



Om  $P_{ex}$  är konstant  $w = -P_{ex}\Delta V$

Godtycklig process

$$w = -\int P_{ex} dV$$

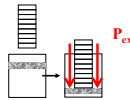
För reversibel process

$$w = -\int P_{gas} dV$$

Inlämningsuppgift 1

### Irreversibel och reversibel process

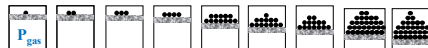
Irreversibel = snabb kompression



Reversibel = mycket långsam kompression



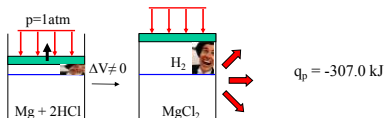
$$P_{gas} = P_{ex}$$



Reversibla processer är viktiga idealfall, för då är förlusterna som minst

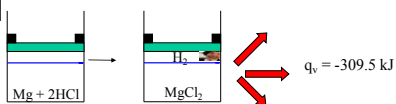
### En del reaktioner utför ett arbete

Konstant tryck



Om volymen ökar, så går en del av reaktions-energin  $\Delta U$ , åt att trycka undan den omgivande luften.  
Då blir det mindre värme kvar att avge än då volymen är konstant.

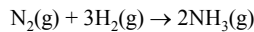
Konstant volym



### Entalpi

### Reaktions-entalpi

Reaktionsentalpin  $\Delta H_r$  beräknas enklast med bildningsentalpierna

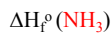


$$\begin{aligned} \Delta H_r^\circ &= \Delta H_f^\circ(\text{produkter}) - \Delta H_f^\circ(\text{reaktanter}) = \\ &= 2\Delta H_f^\circ(NH_3) - \Delta H_f^\circ(N_2) - 3\Delta H_f^\circ(H_2) = \\ &= 2(-46.11) - 0 - 3 \cdot 0 = -92.2 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

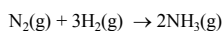
Tabell 6.5 och Appendix 2A

## Definition av bildningsentalpi

Bildningsentalpin för ammoniak



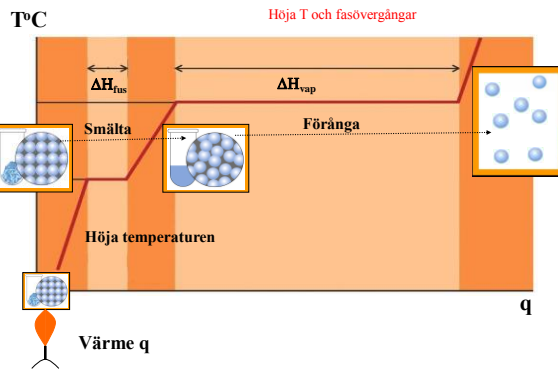
är reaktionsentalpin då ammoniak bildas ur grundämnena i sina mest stabila former



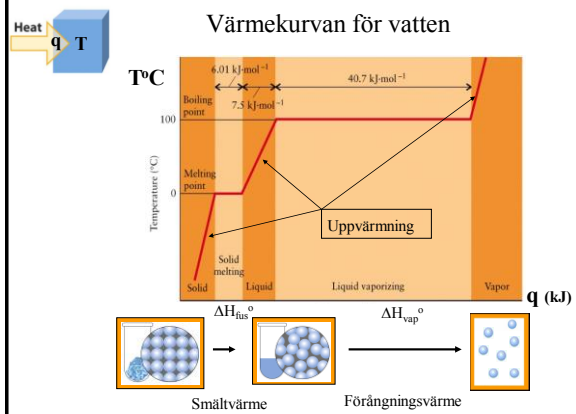
$$\Delta H_f^\circ(\text{NH}_3) = -46.11 \text{ kJ/mol} - (0 + 0)$$

## Värmetillförel: två slags effekter

Höja T och fasövergångar

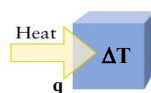


## Värmekurvan för vatten



## Hur man beräknar värmets q

### A. För viss fas (s, l, g)



$$q = C \Delta T$$

Värmekapacitet

$$C = n C_m = m C_s$$

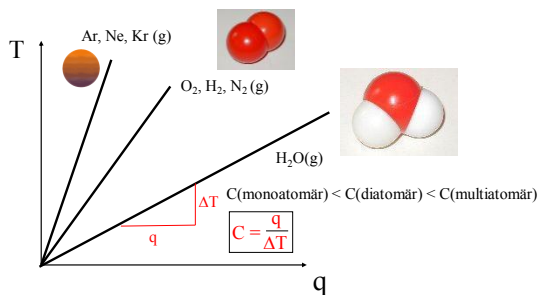
↑ molär                      ↑ specifik  
(per mol)                      (per gram)

### B. Vid fasomvandling

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

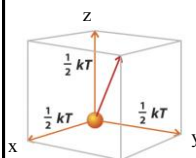
$$(l) \rightarrow (g) \quad q = \Delta H_{\text{vap}}^\circ \quad (\text{förångning})$$

## Värmekapaciteten för olika ämnen



Ju mer komplex molekyl desto högre värmekapacitet

## Temperaturen är ett mått på medelvärdet av kinetiska energin



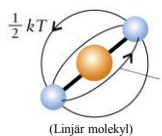
### Translation

Per mol  
 $\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{3}{2} RT$

Per molekyl

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{3}{2} RT / N_A = \frac{3}{2} kT$$

dar  $k = R/N_A = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$   
 är Boltzmanns konstant



### Rotation

$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{1}{2} RT$