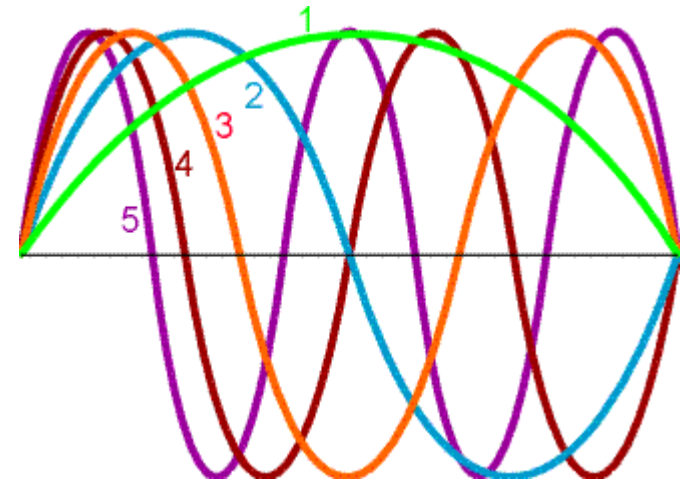
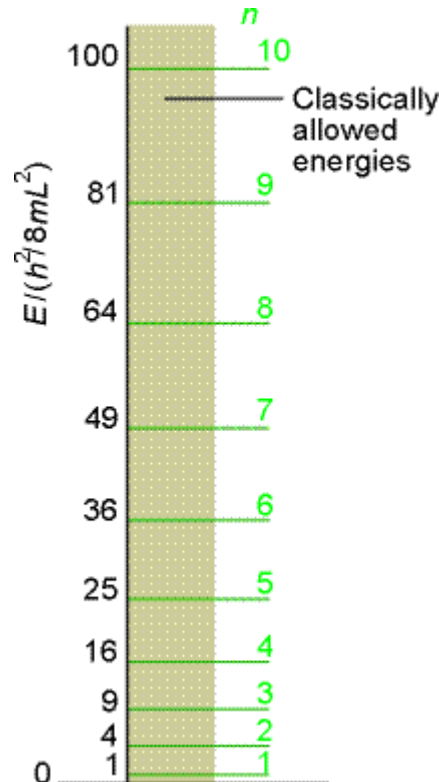
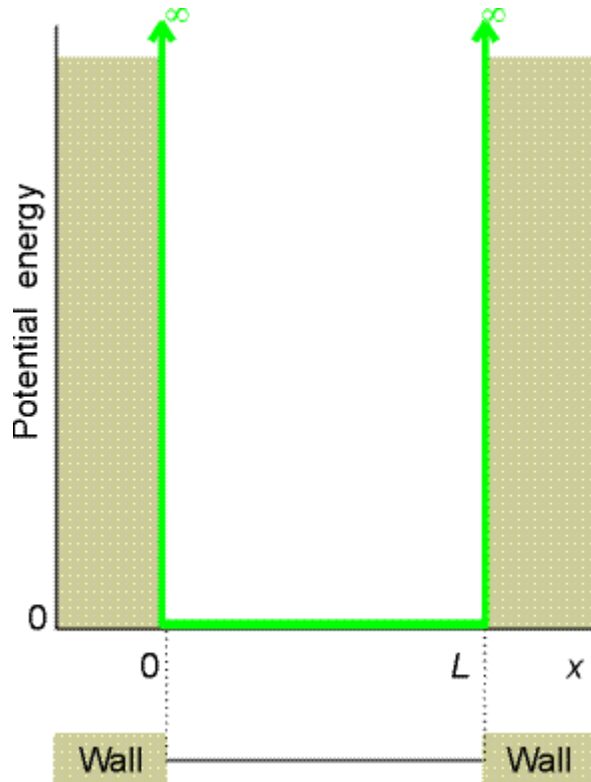


Kemi och biokemi för K, Kf och Bt, 2012

Föreläsning 7

Repetition – summering av kemisk bindning
Bindnings –bildnings - förbränningsenergier

Partikel i en 1D låda



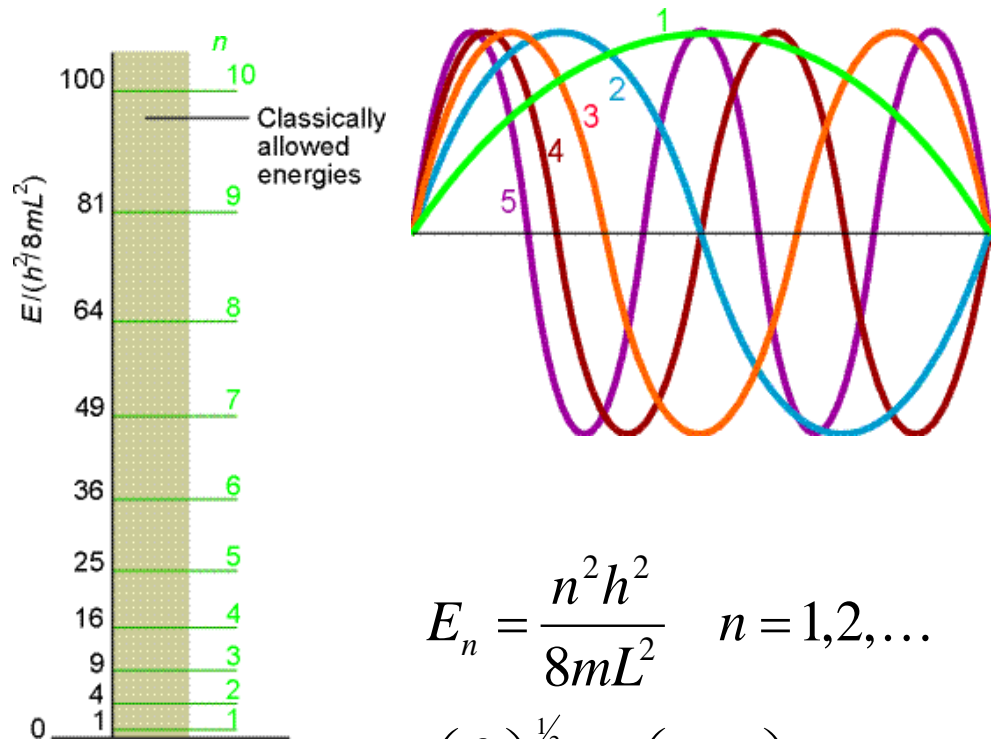
$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

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

Varför är PiL viktig?

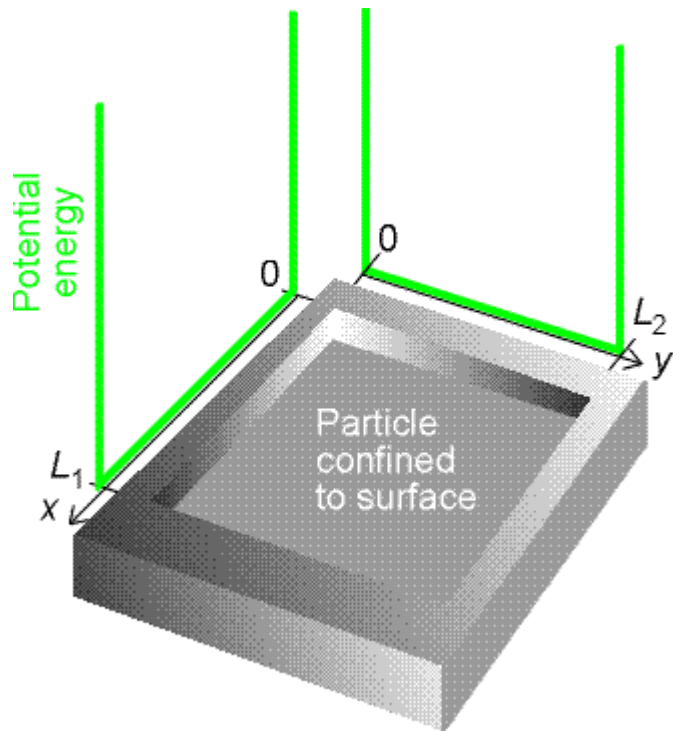
Ger oss en enkel modell med de viktigaste kvantmekaniska nyckelegenskaperna:

- Kvantisering
- Nollpunktsenergi
- Energi – antal noder
- Lådlängden
- Frågor??

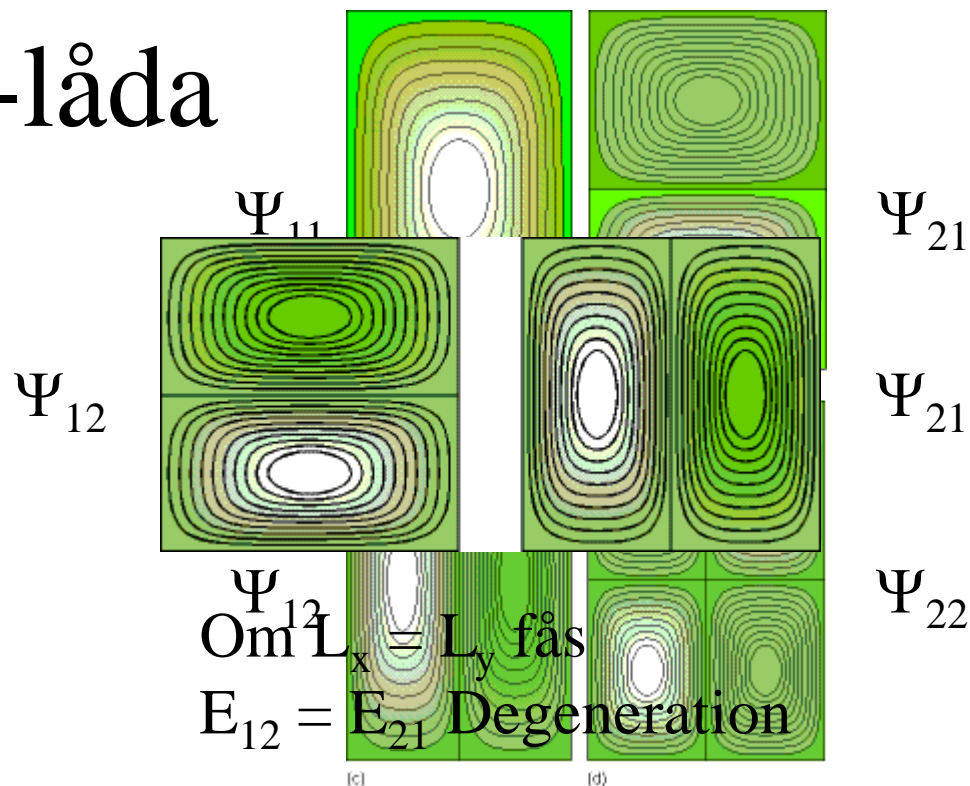


$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

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



2D-låda



$$E = E_{n_x} + E_{n_y} = \frac{n_x^2 h^2}{8mL_x^2} + \frac{n_y^2 h^2}{8mL_y^2} \quad n_x, n_y = 1, 2, \dots$$

$$\Psi = \Psi_{n_x} \Psi_{n_y} = \frac{2}{(L_x L_y)^{1/2}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \quad 0 \leq x \leq L_x \quad 0 \leq y \leq L_y$$

Atomorbitaler

Kemisk bindning: Atomer bildar molekyler mha elektronerna.
Elektronerna är utsmetade vågor, inte partiklar som rör sig i skal.

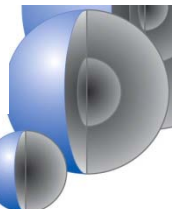
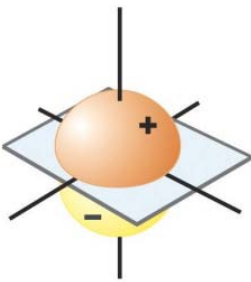
”Skal”

orbitaler

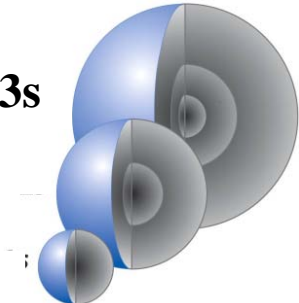
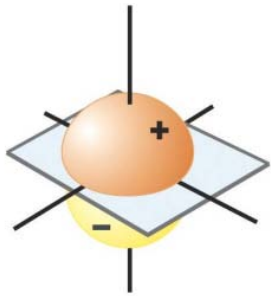
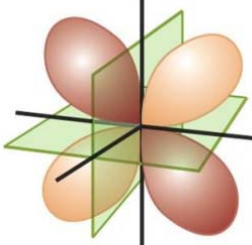
K

$n = 1$ 1s  $l = 0$

L

$n = 2$ 2s  $l = 1$


M

$n = 3$ 3s  $l = 2$
 $3p_z$  $3d_{yz}$

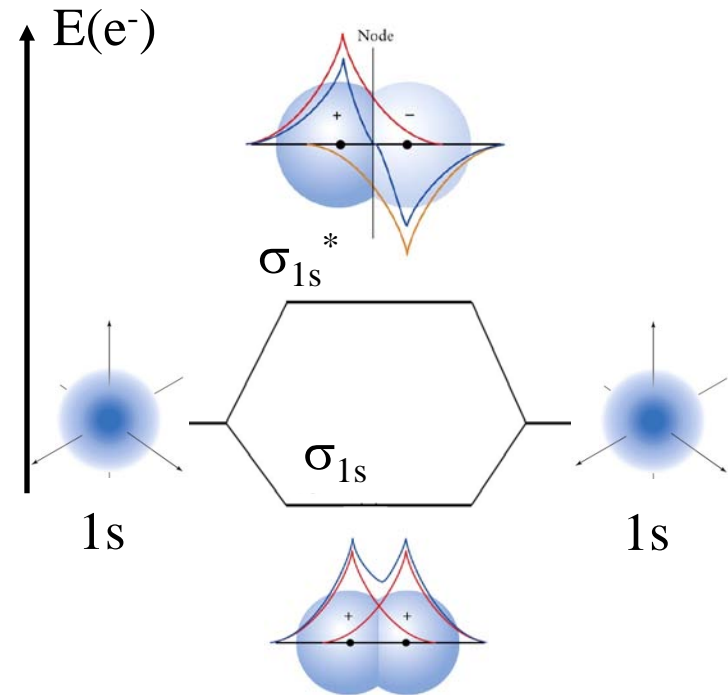
Elektronerna i ett visst
”skal” är inte alla likadana

Repetition: Olika modeller för kemisk bindning

Lewis + VSEPR

1. Bindningsstruktur
(inklusive fria elektronpar och resonans)
2. Bindningsordning
3. Laddningsfördelning
(formell laddning)
4. Intermolekylär vxv
(Dipol? Vätebindning?)
5. Lewis-syror och baser
6. 3D-struktur (VSEPR)

Molekylorbitaler



Atomer bildar molekyler för att energin blir lägre

Varför bildas inte He_2

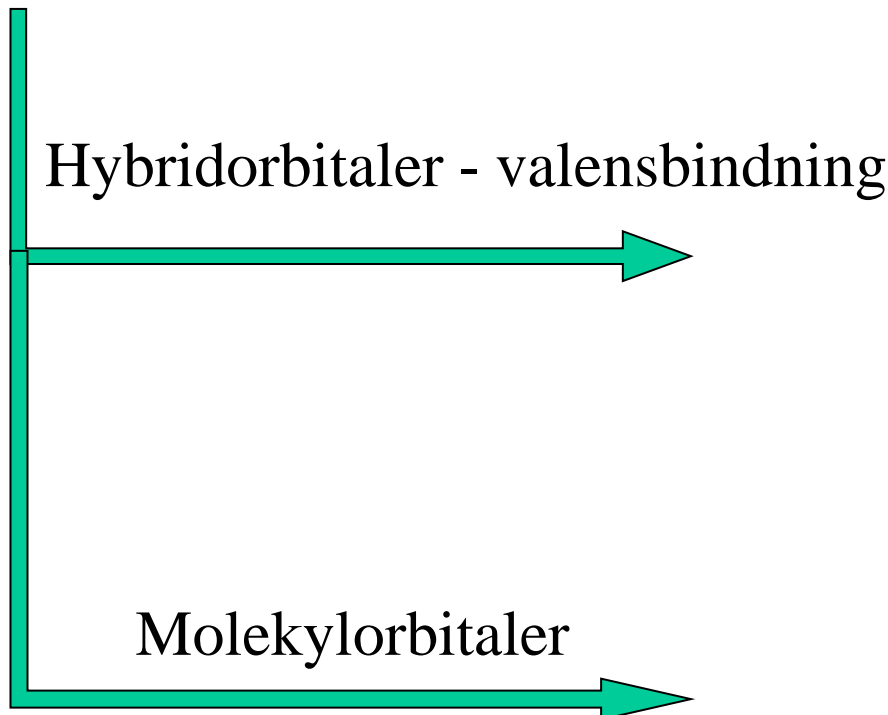
Modeller för kemisk bindning är – just det – **bara Modeller av samma verklighet.** Används för olika ändamål.

Lewis + VSEPR

NH₃



8 st valens el., oktettregel

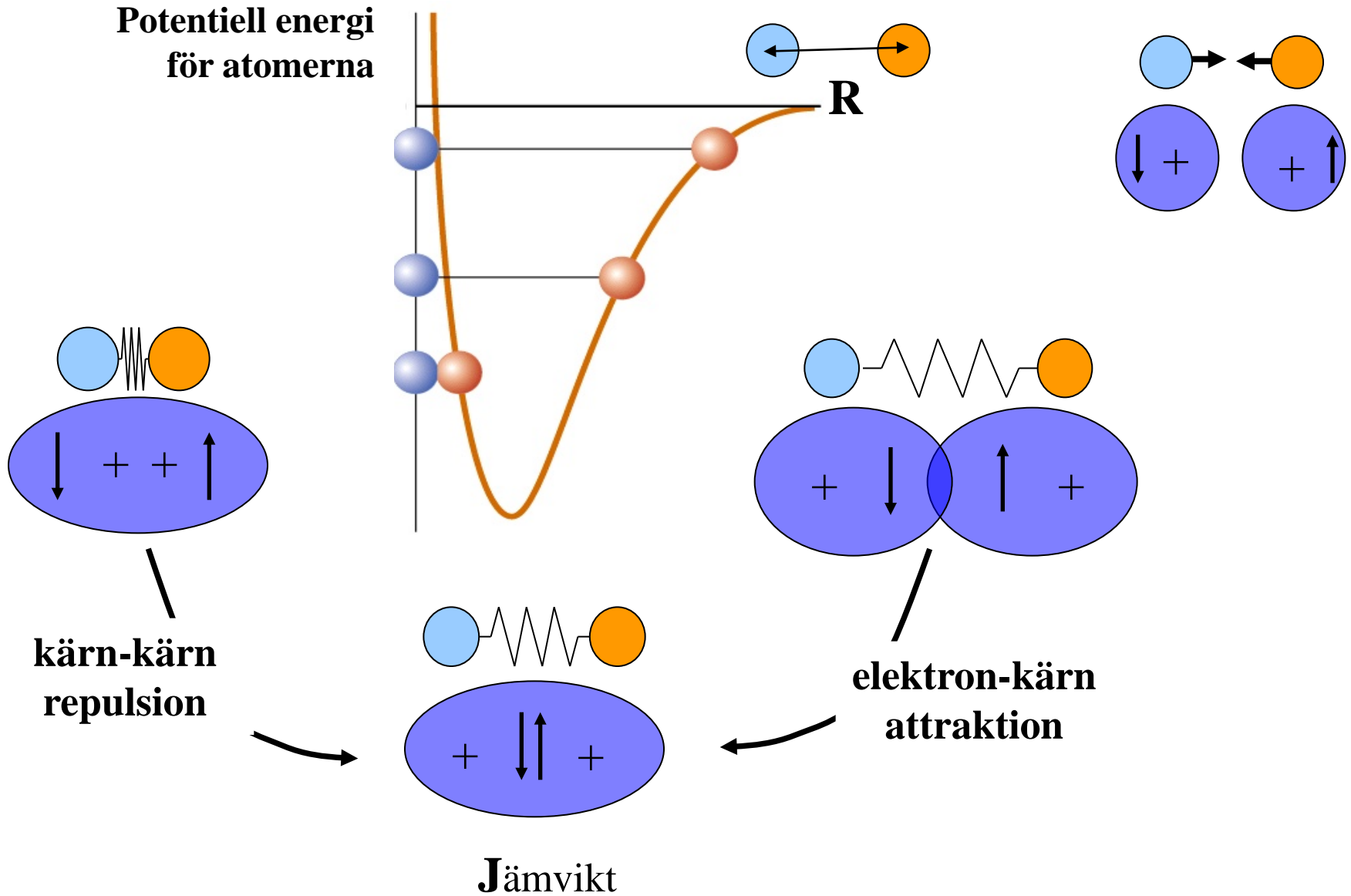


sp³ på kväve

1s på väte

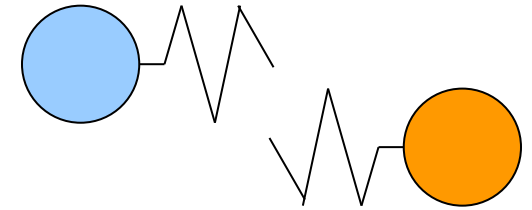
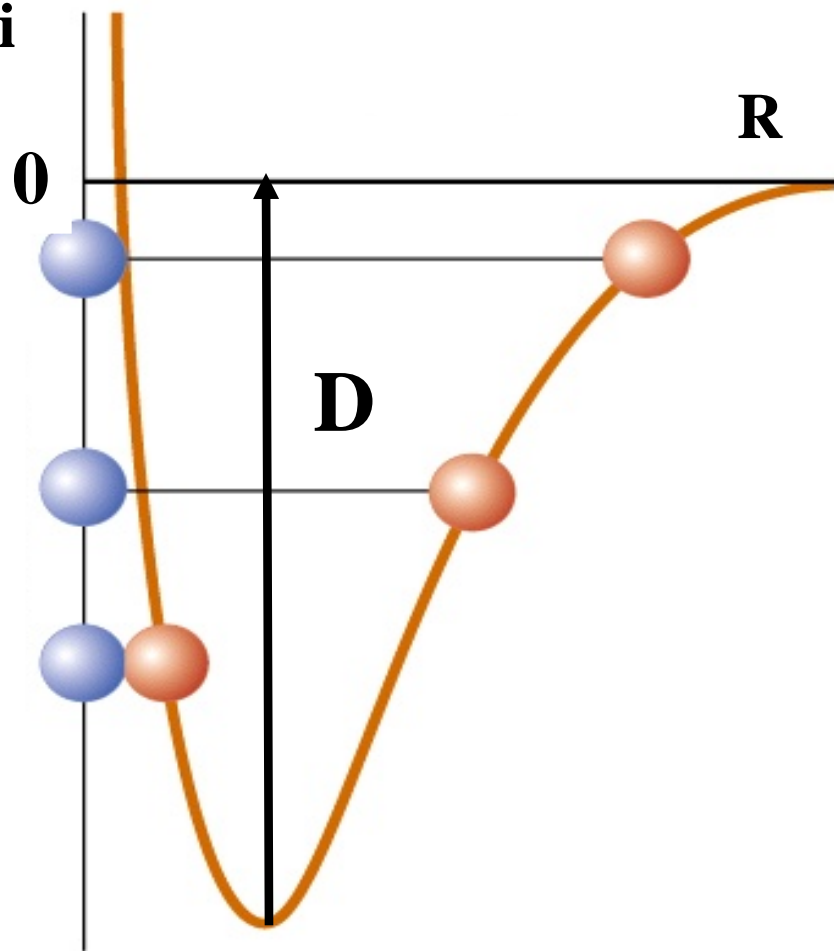
MO-calc

Hur atomer dras till varandra



Molekylens bindningsenergi

Energi



Bindningsenergier

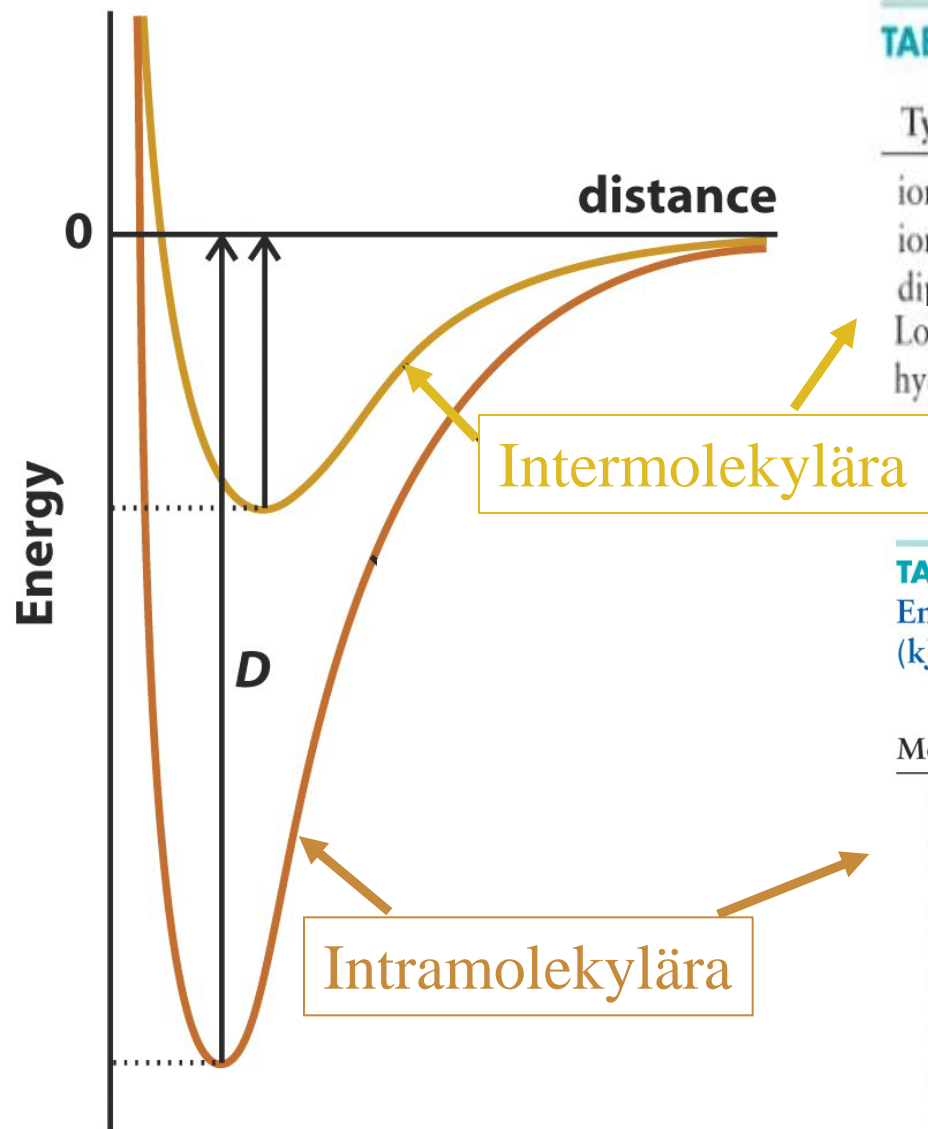


TABLE 5.1 Interionic and Intermolecular Interactions*

Type of interaction	Typical energy (kJ·mol ⁻¹)
ion-ion	250
ion-dipole	15
dipole-dipole	2
London (dispersion) [†]	2
hydrogen bonding	20

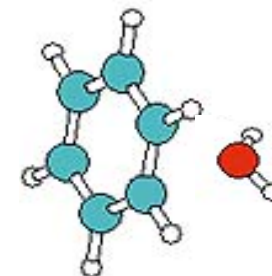


TABLE 2.2 Bond Dissociation Energies of Diatomic Molecules (kJ·mol⁻¹)

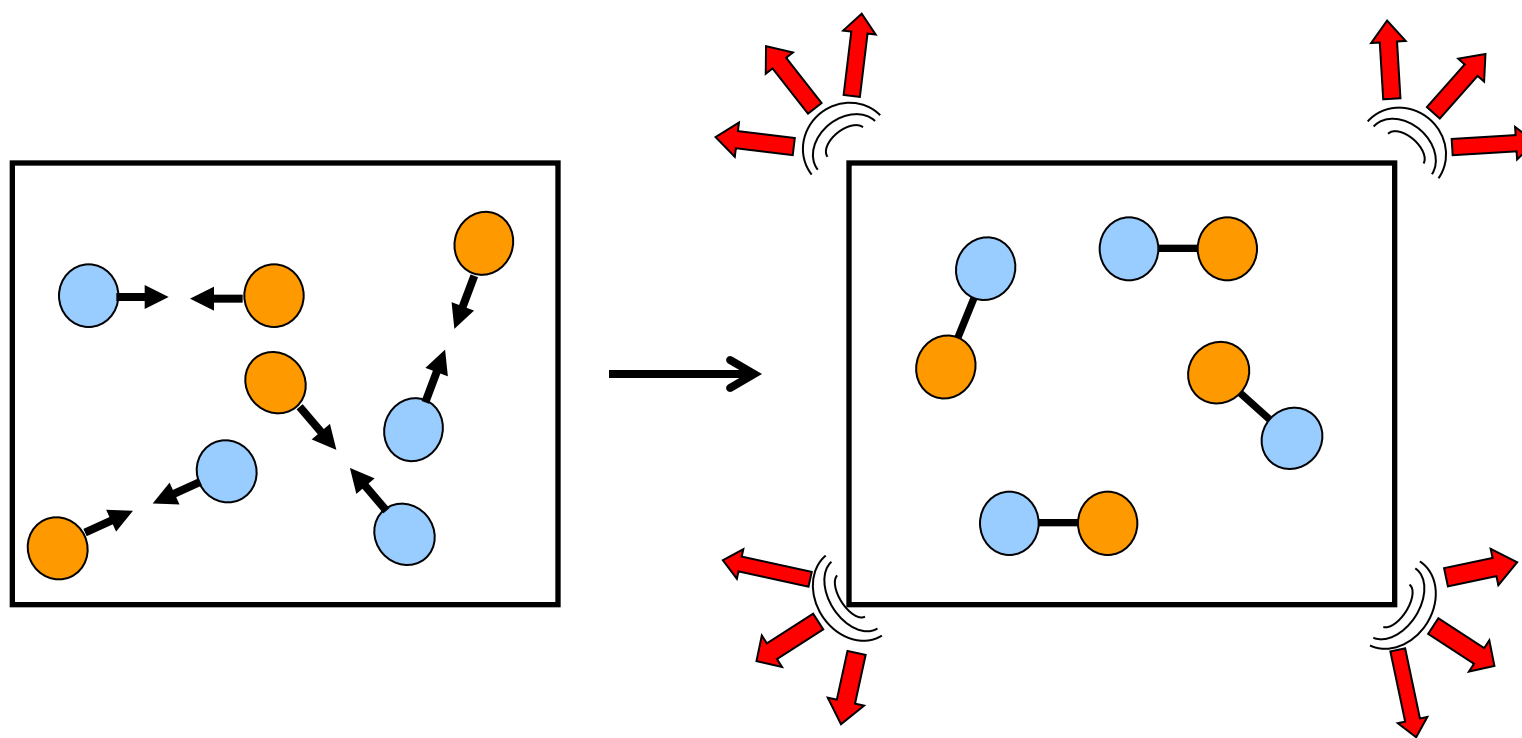
Molecule	Bond dissociation energy
H ₂	424
N ₂	932
O ₂	484
CO	1062
F ₂	146
Cl ₂	230
Br ₂	181
I ₂	139
HF	543
HCl	419
HBr	354
HI	287



Jämför med
termisk energi
vid 25°C
RT = 2.5 kJ/mol

En enkel kemisk reaktion

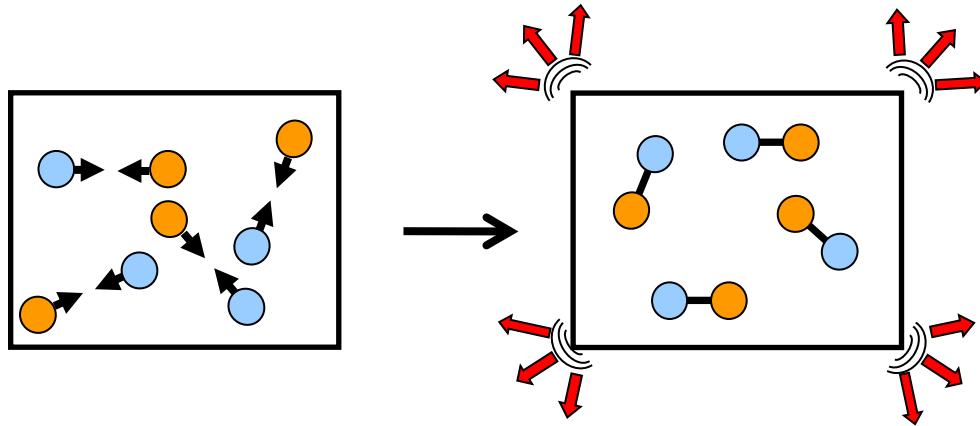
Atomer bildar molekyler, ty då minskar deras (elektroners) energi



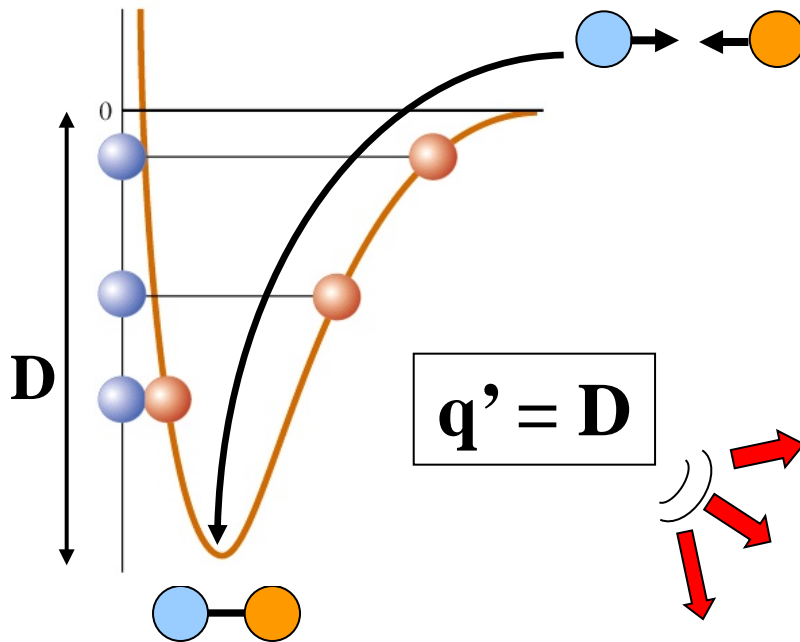
Överskottsenergin blir värme i omgivningen

Reaktionen är exoterm !

Hur mycket värmeenergi frigörs vid reaktionen ?

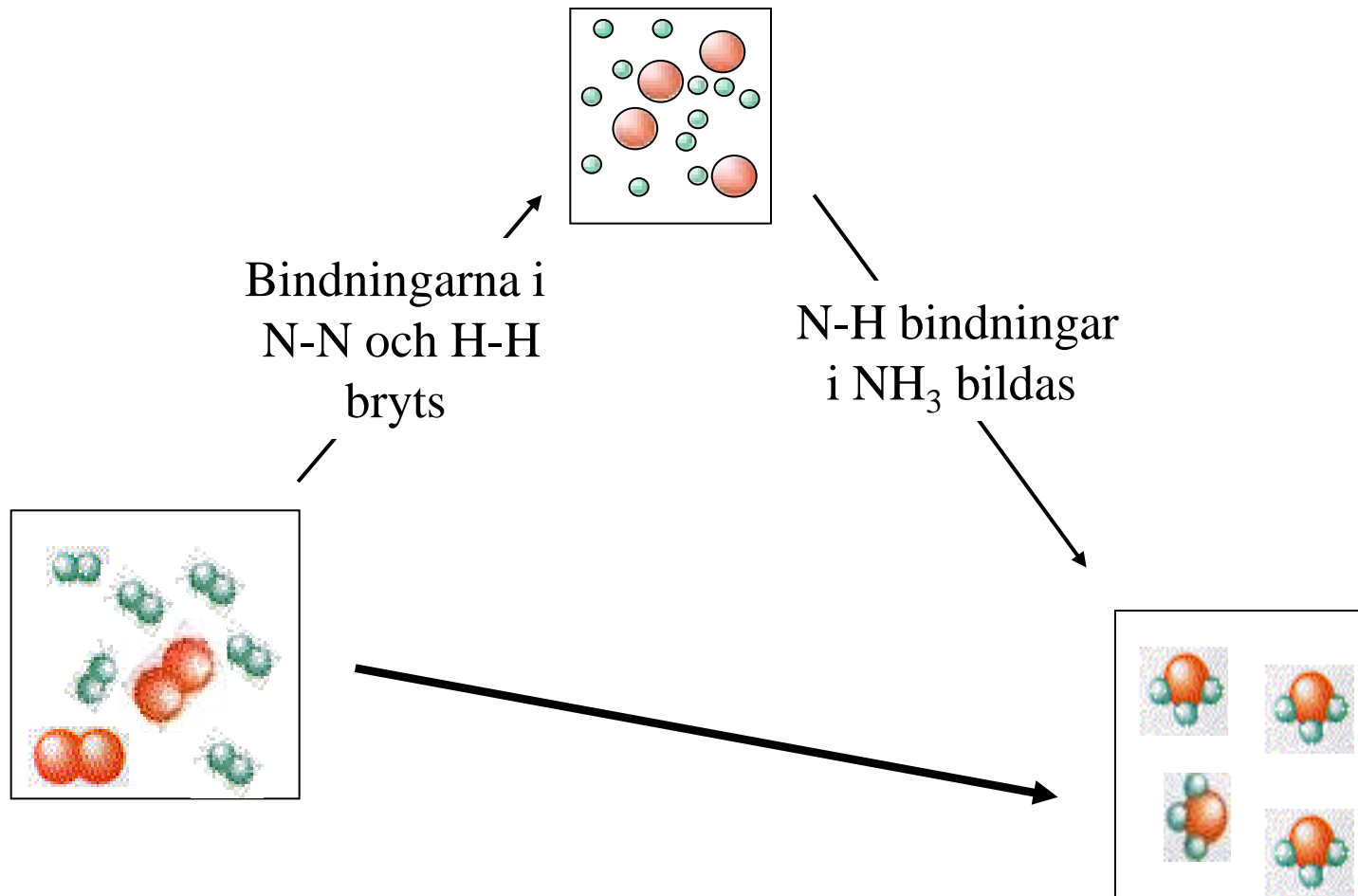
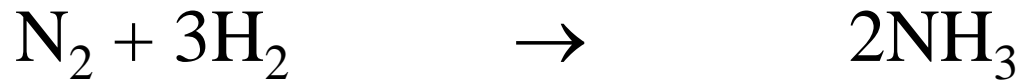


**Frigjord
värmeenergi: q'**



Ammoniak-reaktionen är mer komplicerad

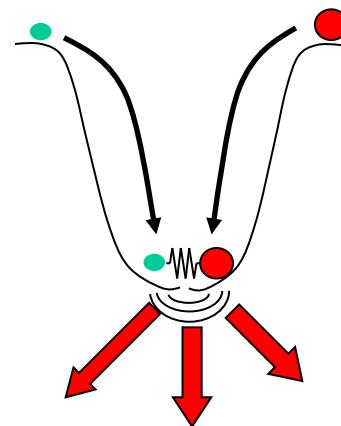
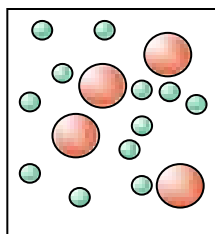
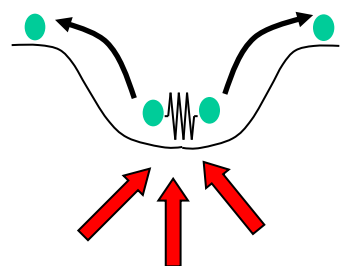
bindningar både bryts och bildas



Energierna som omsätts i reaktionen

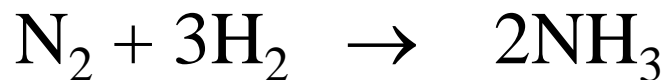
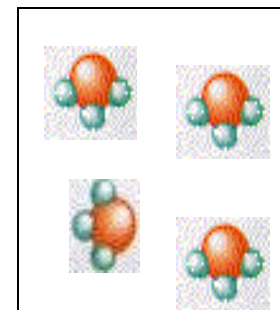
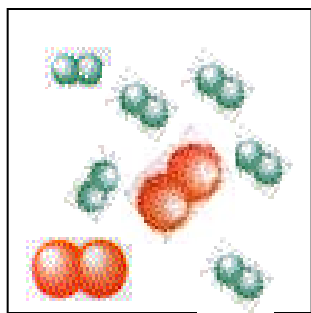
Energi

Obs: Hypotetisk reaktionsväg!



$$E_{in}: D(N\equiv N) + 3 D(H-H)$$

$$E_{ut}: 6 D(N-H)$$



q'

Frigjord energi $q' = E(\text{reaktant}) - E(\text{produkt}) = D(N-N) + 3D(H-H) - 6D(N-H) =$ (Nästa sida)

Tabellvärden på dissociationsenergies D – Bindningsenergies

Enskilda bindningar i fleratomiga molekyler

TABLE 2.3 Average Bond Dissociation Energies (kJ·mol⁻¹)

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		

Diatomära molekyler

TABLE 2.2 Bond Dissociation Energies of Diatomic Molecules (kJ·mol⁻¹)

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

Lewis:

H₂ enkelbindning

O₂ dubbelbindning

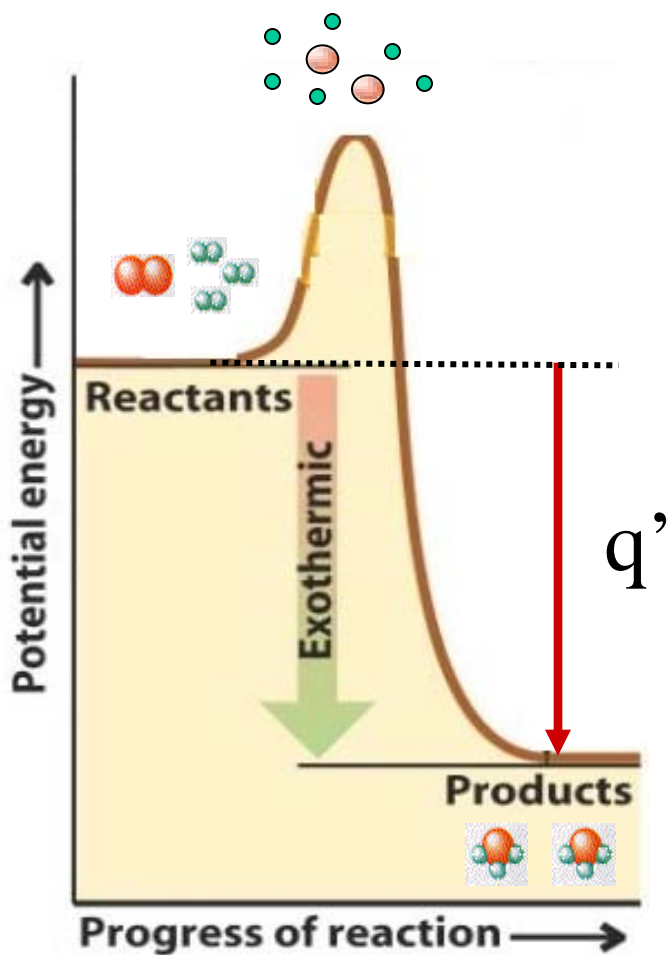
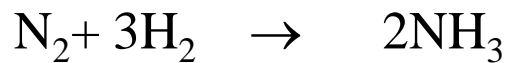
N₂ trippelbindning

Fråga: CO?

Medelvärden

$$q' \dots = 932 + 3 \times 424 - 6 \times 388 = -124 \text{ kJ/mol (Experimentellt värde är -92 kJ/mol)}$$

Ammoniak-reaktionens energi-profil

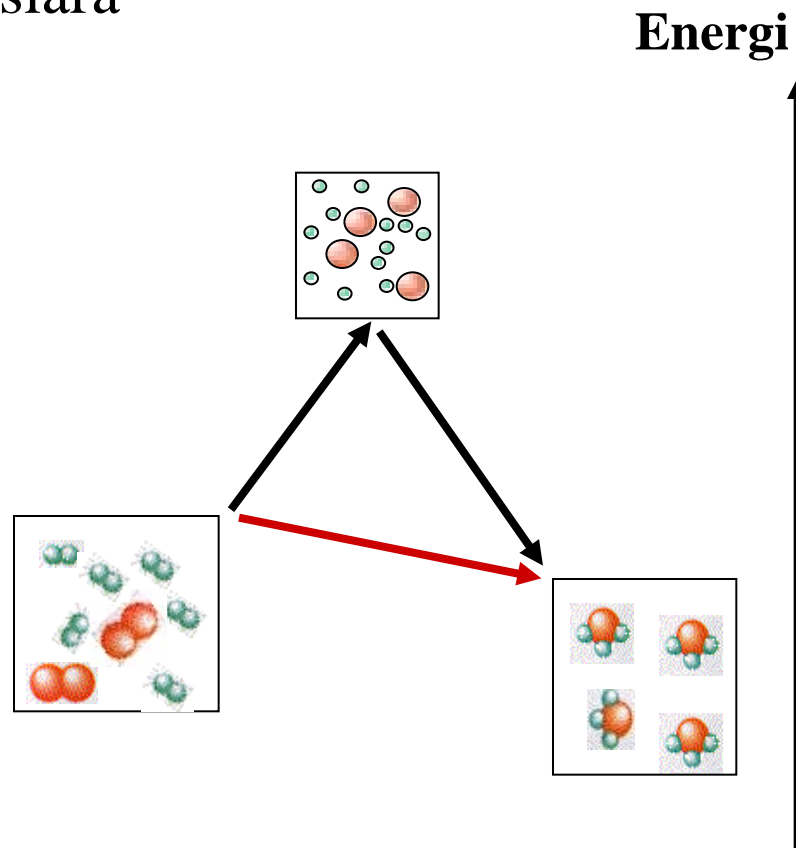


Lp II

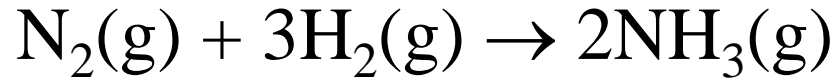
Termodynamik

Jämviktslära

Kinetik



Reaktionsentalpin ΔH_r beräknas mer exakt
med **bildnings**entalpierna



$$\begin{aligned}\Delta H_r^\circ &= \Delta H_f^\circ(\text{produkter}) - \Delta H_f^\circ(\text{reaktanter}) = \{\text{Hess lag}\} \\ &= 2\Delta H_f^\circ(\text{NH}_3) - \Delta H_f^\circ(\text{N}_2) - 3\Delta H_f^\circ(\text{H}_2) = \\ &= 2 \cdot (-46.11) \quad - \quad 0 \quad - \quad 3 \cdot 0 = -92.2 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

Tabell 7.5 och Appendix 2A

Definition av bildningsentalpi

Bildningsentalpin för ammoniak



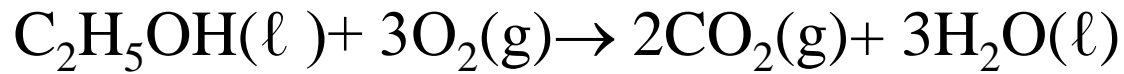
är reaktionsentalpin då ammoniak bildas ur grundämnena i sina mest stabila former



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

Förbränningsentalpi

Entalpi som frigörs vid fullständig förbränning av 1 mol av substansen under standardbetingelser (mer om det nästa vecka)



$$\Delta H_c^\circ = \Delta H_f^\circ(\text{produkter}) - \Delta H_f^\circ(\text{reaktanter}) = \{\text{Hess lag}\}$$

$$= 2\Delta H_f^\circ(\text{CO}_2) + 3\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}) - \Delta H_f^\circ(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) - 3\Delta H_f^\circ(\text{O}_2) =$$

$$= 2 \cdot (-393.51) + 3 \cdot (-285.83) - (-277.69) - 3 \cdot 0 = -1368 \text{ kJ/mol}$$

Tabell 7.4 och Appendix 2A

