

# Noter til 5 ECTS - Almen Kemi

## Indholdsfortegnelse

<b>Grundlæggende fysisk kemi .....</b>	<b>- 4 -</b>
<i>Termodynamikkens hovedsætninger .....</i>	<i>- 4 -</i>
<i>Potentiel og kinetisk energi.....</i>	<i>- 4 -</i>
<i>Arbejde, varme og energi.....</i>	<i>- 5 -</i>
<i>Enthalpi.....</i>	<i>- 5 -</i>
<i>Varmekapacitet.....</i>	<i>- 6 -</i>
<i>Entropi .....</i>	<i>- 6 -</i>
<i>Gibbs-energi .....</i>	<i>- 7 -</i>
<i>Kemisk potentiale.....</i>	<i>- 9 -</i>
<i>Spontanitet .....</i>	<i>- 10 -</i>
<i>Hess' lov .....</i>	<i>- 10 -</i>
<i>Calorimetri.....</i>	<i>- 11 -</i>
<b>Ligevægte.....</b>	<b>- 12 -</b>
<i>Ligevægtskonstanten.....</i>	<i>- 12 -</i>
<i>Reaktionsbrøken <math>Q</math>.....</i>	<i>- 14 -</i>
<i>Den reciprokke værdi.....</i>	<i>- 14 -</i>
<i>Sammenhæng mellem <math>K</math>, <math>Q</math> og fri energi .....</i>	<i>- 14 -</i>
<i>Sammenhæng mellem ligevægt og termodynamiske parametre .....</i>	<i>- 15 -</i>
<i>Van't Hoff ligningen .....</i>	<i>- 16 -</i>
<i>Le Chateliers princip .....</i>	<i>- 16 -</i>
<i>Endoterm og exoterm reaktion .....</i>	<i>- 17 -</i>
<i>Aktiviteter og ionstyrker.....</i>	<i>- 18 -</i>
<b>Syre-base ligevægte .....</b>	<b>- 20 -</b>
<i>Syre-base dissociation .....</i>	<i>- 20 -</i>
<i>Basekonstanten .....</i>	<i>- 21 -</i>

## Arbejde, varme og energi

For arbejde og varme kan man betegne dem som:

$$\text{Arbejde (} w \text{)} = \text{kraft der påvirkes over en given afstand}$$

*Varmeoverførsel (} q \text{)} = \text{Udveksling af energi mellem to stoffer pga. temperaturforskel}*

$$\text{Energi (} E \text{)} = \text{Kapacitet til at udføre arbejde eller producere varme}$$

For at beregne indre energi, kan man bruge formlen:

$$\Delta E = q + w$$

Her er  $q$  = varme og  $w$  = arbejde.

## Enthalpi

Definition på enthalpi,  $H$  [ $\frac{kJ}{mol}$ ]:

$$H = E + P \cdot V$$

$\Delta_f H^\circ$  er enthalpi for dannelse (formation) af et stof ved standardbetingelser og kan slås op i tabel.

Standardbetingelser er for en gas 1 atm tryk, for en væske 1 atm tryk og koncentration på 1 M.

Enthalpiændring for reaktion ved standardbetingelser [ $\frac{kJ}{mol}$ ]:

$$\Delta_r H^\circ = \sum \Delta_f H^\circ(\text{produkter}) - \sum \Delta_f H^\circ(\text{reaktanter})$$

### Eksempel:

For reaktionen  $2H_2(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2H_2O(l)$

er  $\Delta_r H^\circ = \Delta_f H^\circ(H_2O, l) - (2 \cdot \Delta_f H^\circ(H_2, g) + \Delta_f H^\circ(O_2, g))$  [ $\frac{kJ}{mol}$ ]

Enthalpiændring for reaktion af  $n$  mol ved standardbetingelser [ $kJ$ ]:

## Spontanitet

Når man snakker om spontanitet, snakker man ikke om hurtigheden af en reaktion.

Desuden gælder der følgende:

$-\Delta H, \Delta S, -\Delta G =$  spontant ved alle temperaturer

$\Delta H, -\Delta S, \Delta G =$  ikke spontant ved alle temperaturer

$\Delta H, \Delta S, \pm\Delta G =$  spontan, hvis temperaturen er høj nok

$-\Delta H, -\Delta S, \pm\Delta G =$  spontan, hvis temperaturen er lav nok

$\Delta H$	$\Delta S$	$\Delta G$	SPONTANITET
negativ	positiv	negativ	SPONTAN ved alle temperaturer
positiv	negativ	positiv	IKKE SPONTAN ved alle temperaturer
positiv	positiv	negativ eller positiv	SPONTAN hvis temperaturen er HØJ NOK
negativ	negativ	positiv eller negativ	SPONTAN hvis temperaturen er LAV NOK

For at en reaktion er spontan, skal den samlede entropi stige. Derfor skal summen af ændringen i systemets og omgivelsernes entropi være positiv, da der så er sket en stigning i entropien i hele universet. Derfor kan man sige en reaktion er spontan når:

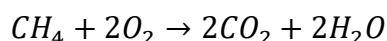
$$\Delta S(\text{system}) + \Delta S(\text{omgivelser}) > 0$$

## Hess' lov

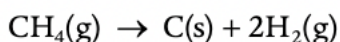
Hess' lov siger:

*Uanset hvilke reaktionstrin der er mellem produkter og reaktanter, vil enthalpiændringen ( $\Delta H_r$ ) være den samme*

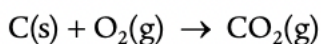
Et eksempel på det er:



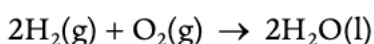
Her sker ingen tab af energi ved delreaktioner:



$$\Delta H^\ominus(1)$$



$$\Delta H^\ominus(2)$$



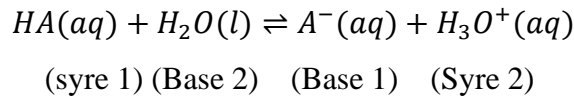
$$\Delta H^\ominus(3)$$

og varmeoptaget/udvikling afhænger kun af forskel på start- og slutbetingelserne.

## Syre-base ligevægte

### Syre-base dissociation

En syre dissocierer med vand:



Reaktionen for syren kan beskrives med en ligevægtskonstant, syrekonstanten,  $K_a$ :

$$K_a = \frac{a_{H_3O^+} \cdot a_{A^-}}{a_{HA}}$$

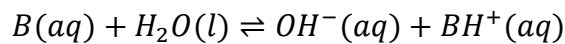
For ideelle betingelser kan der antages, at aktiviteten er lig koncentrationen af et stof:

$$K_a = \frac{[H_3O^+] \cdot [A^-]}{[HA]}$$

Syrestyrken betegnes med  $pK_a$  værdien, som udregnes:

$$pK_a = -\log K_a$$

En base dissocierer med vand:



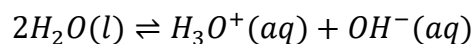
For denne kan basekonstanten opskrives:

$$K_b = \frac{[BH^+] \cdot [OH^-]}{[B]}$$

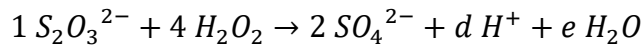
Og  $pK_b$  udregnes, og kan bruges som mål for basens styrke

$$pK_b = -\log K_b$$

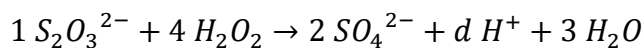
Vands autoprotolyse:



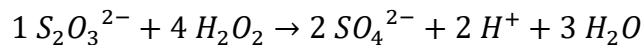
Da alle S fra  $S_2O_3^{2-}$  bliver til  $SO_4^{2-}$ , skal  $c = 2$  for at afstemme S.



For at afstemme O kan det ses, at der er 11 O på venstre side, og kun 8 på højre side. De sidste 3 O kan findes ved vand, så  $e = 3$

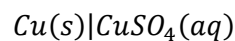
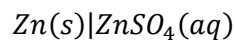


For at afstemme H, skal  $d = 2$ , hvilket får ladningen til at blive 0, og ladningen på begge sider er -2.



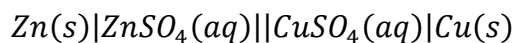
### Halvcelle- og cellediagrammer

For disse kan der opstilles halvcelledagrammer:



Hvor den lodrette streg angiver en faseadskillelse.

Cellediagram: En sammenskrivning af halvcellediagrammerne, med reduktionen (elektronoptag) på højre side og oxidationen (elektronafgivelsen) på venstre side:



Her afgiver Zn (s) elektroner og  $Cu^{2+}$  optager elektroner.

Derfor vil svaret være:  $4,22 * 10^{-4}\%$

**Opg 12: Hvad er vægten af  $H_2SO_4$  (molar masse = 98.1) i 50 ml med en koncentration på 6M?**

Vi finder først stofmængden:

$$c = \frac{n}{V} \rightarrow n = c * V$$

$$n = 6,00 \frac{mol}{L} * 0,05L = 0,3 mol$$

Derefter kan vi finde vægten:

$$n = \frac{m}{M} \rightarrow m = n * M$$

$$m = 0,3 mol * 98,1 \frac{g}{mol} = 29,43g$$

**Opg 13: Hvad er koncentrationen af  $Na^+$  når 70 ml 3M  $Na_2CO_3$  tilsættes til 30 ml 1M  $NaHCO_3$ ?**

Først finder vi stofmængden i de 70 ml og de 30 ml:

70 ml:

$$n = 3 \frac{mol}{L} * 0,07L = 0,21 mol$$

30 ml:

$$n = 1 \frac{mol}{L} * 0,03L = 0,03 mol$$

Herefter kan vi finde den samlede mængde:

$$c = \frac{n}{V}$$

$$c = \frac{(0,21 * 2) + 0,03}{0,07 + 0,03}$$