



**KEMI 2:
SAMMANFATTNING BLOCK 2
NIKLAS DAHRÉN**



**DET VIKTIGASTE FRÅN:
BLOCK 2, DEL 1**

Kemiska reaktioner

- ✓ När två partiklar (atomer, molekyler, joner etc.) kolliderar med varandra kan ibland en kemisk reaktion ske. De kolliderande reaktanterna omvandlas till en eller flera produkter. Reaktanterna A och B kan t.ex. bilda produkterna C och D enligt följande reaktion:



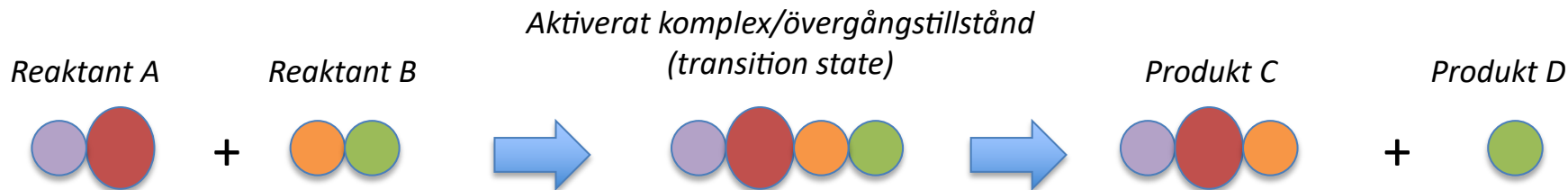
- ✓ Vätgas (H₂) krockar med syrgas (O₂) så att vatten bildas enligt följande reaktion:



- ✓ **Gamla bindningar bryts:** I kemiska reaktioner bryts i de flesta fall gamla bindningar. I exemplet med vätgas och syrgas bryts de gamla bindningarna mellan de båda väteatomerna i vätemolekylen och mellan de båda syreatomerna i syremolekylen.
- ✓ **Nya bindningar skapas:** I kemiska reaktioner skapas i de flesta fall nya bindningar. I exemplet med vätgas och syrgas skapas nya bindningar mellan väteatomer och syreatomer så att vattenmolekyler bildas.

Aktiverat komplex (övergångstillstånd)

- ✓ **Aktiverat komplex bildas:** När reaktanterna krockar med varandra bildas först ett aktiverat komplex (ett övergångstillstånd med hög energi) som sedan snabbt ger upphov till de färdiga produkterna. I det aktiverade komplexet bryts gamla bindningar och nya skapas. Det aktiverade komplexet existerar under en mycket kort tid (ca 10^{-12} sekunder).



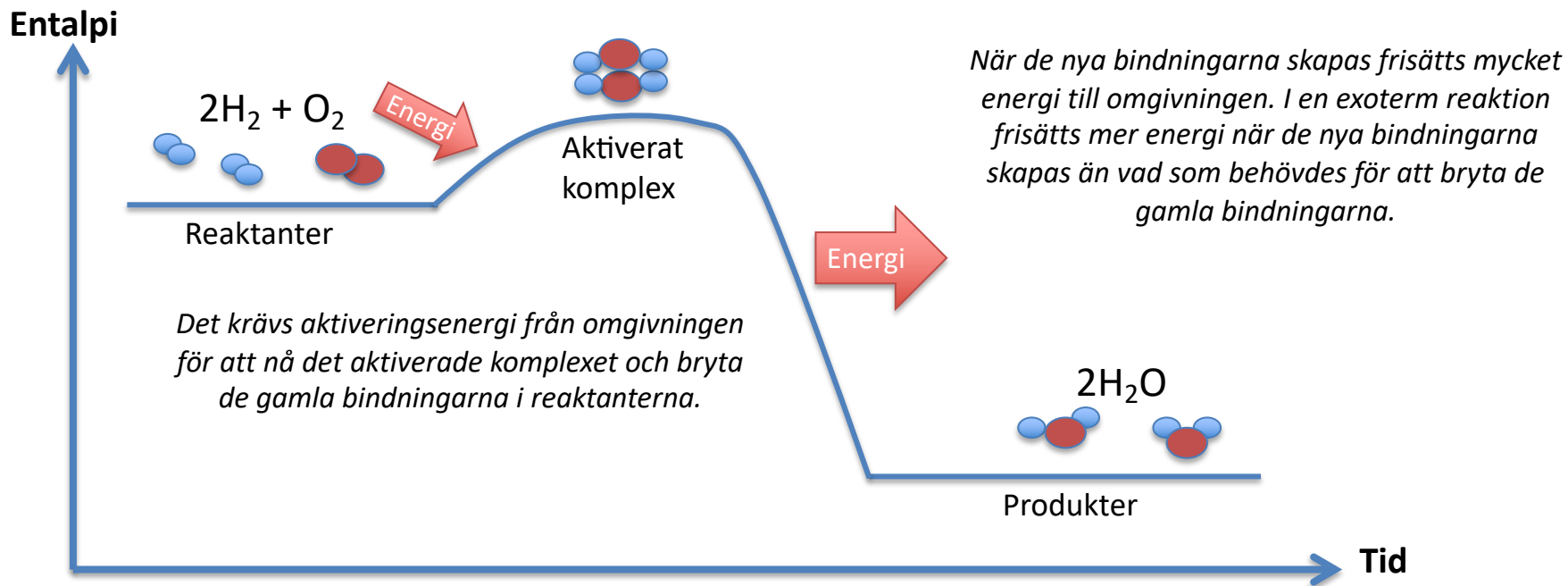
Vad krävs för att en reaktion ska ske?

- ✓ **Reaktanterna måste krocka med varandra:** Alla reaktioner sker genom att reaktanter krockar med varandra. Det är först då som det aktiverade komplexet kan bildas och gamla bindningar kan brytas och nya bindningar kan bildas.
- ✓ **Reaktanterna måste ha tillräcklig hög rörelseenergi:** Reaktanterna måste ha så pass hög rörelseenergi (hastighet) att de tillsammans kan bilda det aktiverade komplexet. Om de har för låg rörelseenergi kommer de bara studsas mot varandra och ingen reaktion kommer kunna ske.
- ✓ **Reaktanterna måste krocka med varandra i rätt vinkel:** Det spelar ingen roll om reaktanterna har tillräcklig hög hastighet om krocken sker ur fel vinkel. För att en viss reaktion ska kunna ske måste nämligen de två partiklarna kollidera på ett visst sätt, de måste ha rätt vinkel i förhållande till varandra. De flesta kollisioner kommer därför inte kunna leda till någon reaktion eftersom de krockar på fel sätt.

Aktiveringsenergi

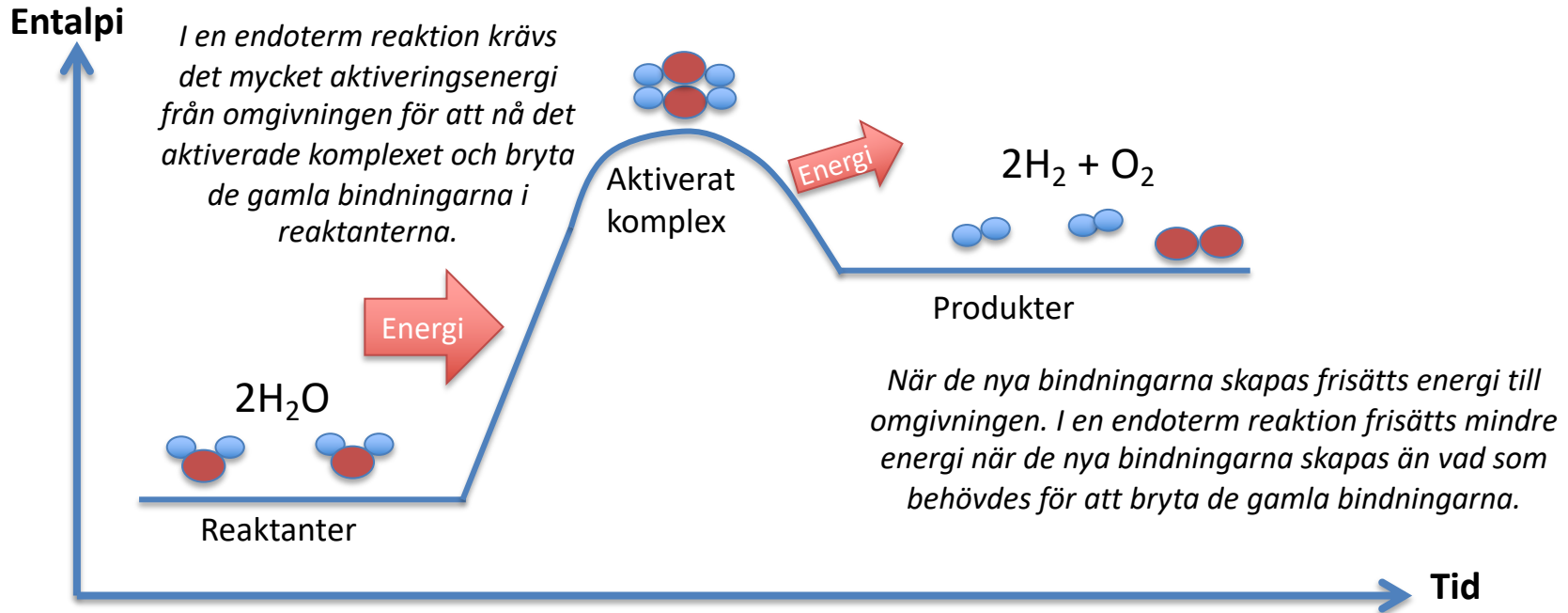
- ✓ **Den energi som behövs** för att hjälpa igång en reaktion kallas för "aktiveringsenergi".
- ✓ **Alla reaktioner kräver någon form** av aktiveringsenergi, det gäller både endoterma och exoterma reaktioner.
- ✓ **Aktiveringsenergin (ofta värme) gör så att molekylerna** krockar med högre hastighet och/eller att bindningarna börjar vibrera kraftigt vilket får de gamla bindningarna att brytas lättare. När nya starkare bindningar skapas frisätts en stor mängd energi till omgivningen.
- ✓ **Aktiveringsenergin startar igång de första reaktionerna** men sedan är ofta övriga reaktioner "självgående" eftersom varje reaktion frisätter värme som kan fortsätta driva övriga reaktioner. Det fungerar ungefär som en kedjereaktion.

Exoterma reaktioner kräver aktiveringsenergi för att starta men frisätter sedan ännu mer energi



- ✓ **Aktiveringsenergin (ofta värme) gör så att molekylerna** krockar med högre hastighet och/eller att bindningarna börjar vibrera kraftigt vilket får de gamla bindningarna att brytas lättare. När nya starkare bindningar skapas frisätts en stor mängd energi till omgivningen.

Endoterma reaktioner kräver hög aktiveringsenergi och frisätter sedan en mindre mängd energi



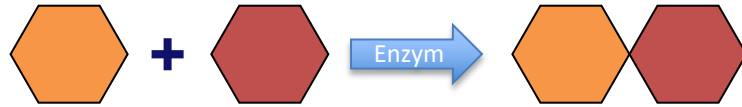
- ✓ **Aktiveringsenergin (ofta värme) gör så att moleklerna** krockar med högre hastighet och/eller att bindningarna börjar vibrera kraftigt vilket får de gamla bindningarna att brytas lättare. När nya starkare bindningar skapas frisätts en stor mängd värmeenergi till omgivningen.

Faktorer som påverkar reaktionshastigheten

- ✓ **Ämnens kemiska egenskaper:** Beroende på vilka ämnen det är så kan de ha olika lätt att reagera med varandra. Vissa ämnen är t.ex. reaktivare än andra ämnen. Om reaktanterna har svårt att reagera med varandra så krävs det stor aktiveringsenergi. Ju högre aktiveringsenergi desto långsammare reaktionshastighet.
- ✓ **Temperatur:** Högre temperatur leder till fler och kraftigare krockar mellan reaktanterna per tidsenhet. Därmed blir reaktionshastigheten högre.
- ✓ **Koncentrationen av reaktanterna:** Om vi har högre koncentration av reaktanterna så kommer reaktionshastigheten att öka eftersom antalet krockar mellan reaktanterna ökar per tidsenhet.
- ✓ **Graden av finfördelning av fasta reaktanter:** Om reaktanterna är i fast form men finfördelade så kommer reaktionen gå snabbare jämfört med om reaktanterna ej är finfördelade. Den totala ytan blir större vilket möjliggör fler reaktioner mellan reaktanterna.
- ✓ **Närvaro av en katalysator:** Katalysatorer sänker behovet av hög aktiveringsenergi genom att dels binda reaktanterna och på olika sätt försvaga de gamla bindningarna och dels hålla reaktanterna i en viss position så att de lättare kan reagera med varandra. Reaktanterna når det aktiverade komplexet lättare och reaktionshastigheten ökar.

Enzymer är biologiska katalysatorer

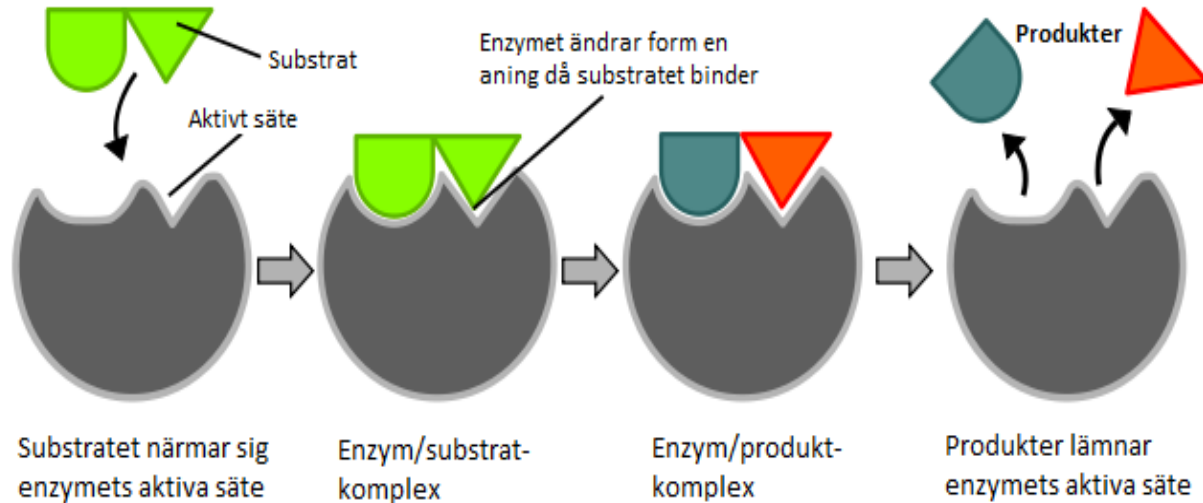
- ✓ **Enzymer fungerar som biologiska katalysatorer** vilket innebär att de i levande organismer påskyndar (och ofta möjliggör) kemiska reaktioner utan att själva förbrukas. De flesta enzymer är proteiner, men undantag finns. T.ex. kan rRNA katalysera kemiska reaktioner i ribosomen när proteiner ska tillverkas där. De flesta av cellens reaktioner är enzymatiska. Utan hjälp av enzymer skulle de metaboliska reaktionerna ske alltför långsamt eller inte alls kunna ske.



Enzymer kan både binda samman små molekyler med varandra så att det bildas större molekyler och spjälka större molekyler så att det bildas mindre molekyler.

Hur fungerar enzymer?

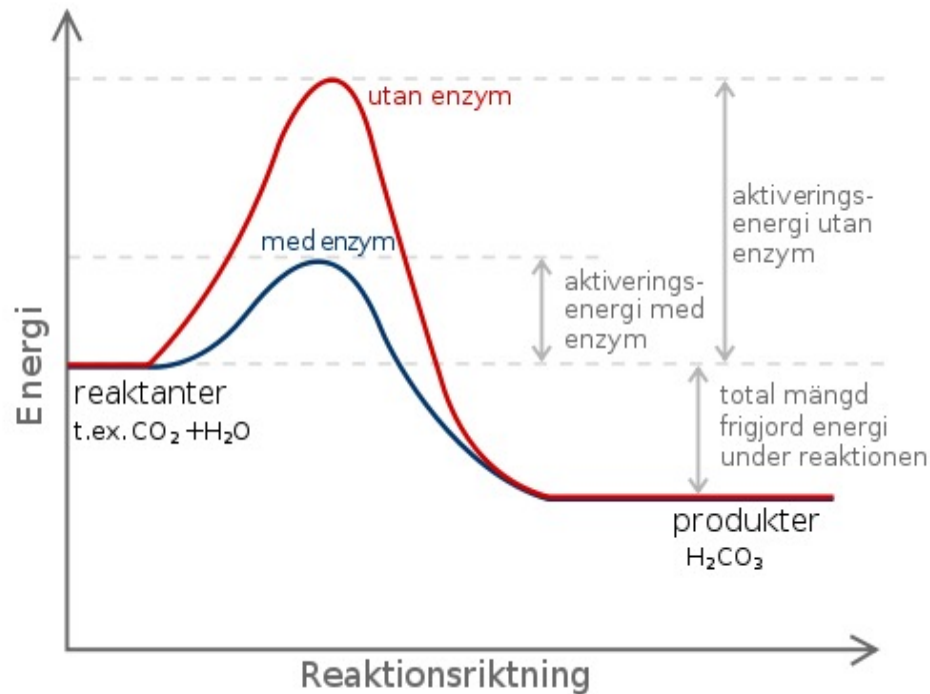
- ✓ **Enzymet binder ett eller flera substrat (beroende på vilken funktion enzymet har) i sitt aktiva säte** (aktivt centrum). Det bildas då ett enzym-/substratkomplex där gamla bindningar försvagas/bryts medan nya bindningar skapas. Enzymet gör så att en eller flera produkter bildas, vi har då fått ett enzym-/produktkomplex. Produkterna frisätts sedan från enzymet.



Reaktionen på bilden är en hydrolysreaktion vilket innebär att bindningen mellan monomererna bryts med hjälp av en vattenmolekyl (syns ej på bilden). En OH-grupp (från vattenmolekylen) kopplas på den ena monomeren medan ett väte (från vattenmolekylen) kopplas på den andra. Nya bindningar skapas alltså även i denna reaktion även om det inte ser ut så på bilden!

Enzymer (och andra katalysatorer) sänker reaktioners aktiveringsenergi

- ✓ **Enzymet binder substratet/substraten på ett perfekt sätt** och försvagar de gamla bindningarna (på olika sätt) vilket underlättar reaktionen. Tack vare detta så behövs det inte någon hög temperatur för att reaktionen ska kunna ske (de gamla bindningarna kommer kunna brytas ändå).

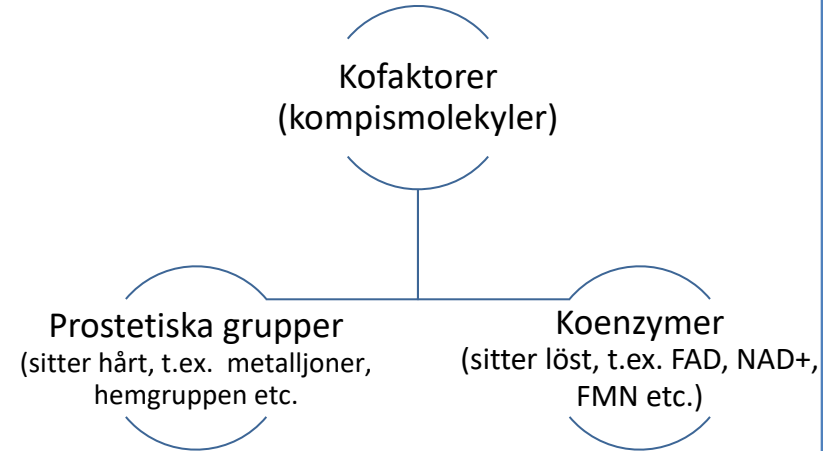


Vad bestämmer hastigheten av enzymkatalyserade reaktioner?

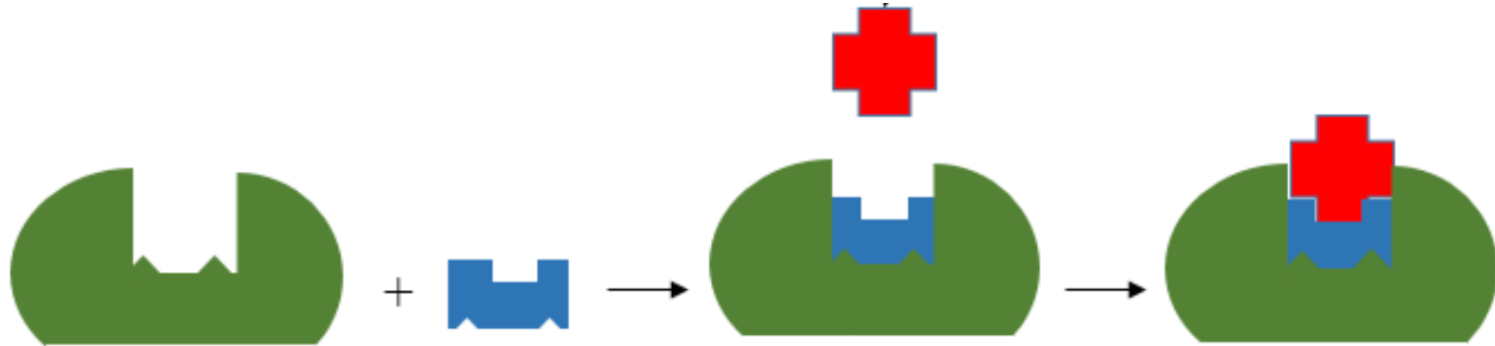
- ✓ **Temperaturen:** Enzymer fungerar bäst vid en viss temperatur (har "temperatur-optima"). En högre temperatur ökar antalet kollisioner mellan substraten och enzymerna (fler "enzym-substratkomplex" bildas per tidsenhet). En högre temperatur hjälper också enzymet att snabbare försvaga de gamla bindningarna så att nya kan skapas. Temperaturen får dock inte vara för hög (individuellt för olika enzymer) eftersom för hög temperatur denaturerar enzymet. Om enzymet förlorar sin tredimensionella form så kan den inte längre binda substratet/substraten.
- ✓ **pH-värdet:** Enzymer har pH-optima. För lågt eller högt pH-värde denaturerar enzymet.
- ✓ **Substrat- och enzymkoncentrationen:** Ju mer substrat (S) desto snabbare reaktion (till en viss gräns; substratmättnad) eftersom det kan bildas fler "enzym-substratkomplex" per tidsenhet. Ju mer enzym (E) desto snabbare reaktion eftersom det kan bildas fler "enzym-substratkomplex" per tidsenhet.
- ✓ **Graden av finfördelning:** I de reaktioner som sker i cellerna är alltid substraten och enzymerna lösta i vatten (alltså finfördelade) men vid reaktioner som sker utanför cellerna (t.ex. i en bägare i labbet) så kanske vi har substraten och/eller enzymerna i fast form. Om vi finfördelar dessa så kommer reaktionen gå snabbare jämfört med om vi inte finfördelar dessa. Den totala ytan blir nämligen större vilket möjliggör fler reaktioner mellan substrat och enzymer.

Kofaktorer (enzymernas ”kompismolekyler”)

- ✓ **Många enzymer kan inte utföra sin funktion** (katalysera sin specifika reaktion) om de inte har hjälp av en ”kompismolekyl” (hjälpärmolekyl). Dessa kallas för *kofaktorer* och binder till det aktiva sätet på olika sätt. Kofaktorer är inte proteiner utan andra typer av ämnen. Kofaktorerna kan delas in i *prostetiska grupper* och *koenzymer*.
- ✓ **Prostetiska grupper:** Dessa består eller innehåller ofta metalljoner. Metalljonerna binder hårt till det aktiva sätet och sitter kvar där hela tiden. *Exempel:* Hemgruppen (innehåller bl.a. en järnjon) som ingår i enzymet cytokrom c (i elektrontransportkedja) och i hemoglobin.
- ✓ **Koenzymer:** Dessa består ofta av organiska föreningar som har bildats från vitaminer. Dessa binder löst till det aktiva sätet och släpper ofta efter att reaktionen har skett. *Exempel:* NAD⁺ och FAD (vätebärare i cellandningen) är exempel på koenzymer.



Koenzymernas funktion

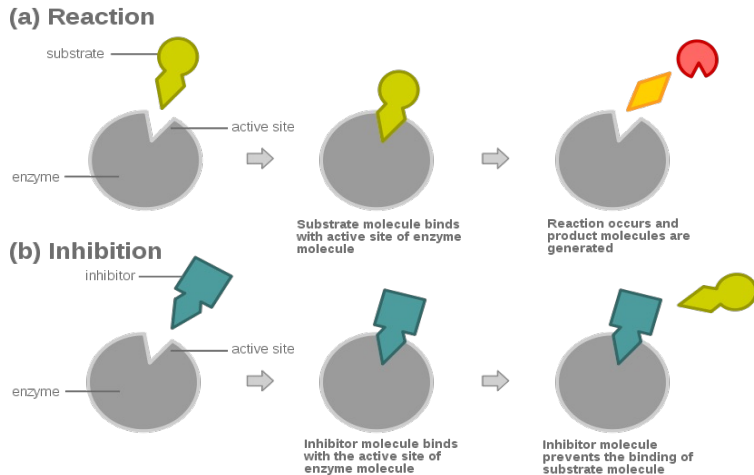


Apoenzym (inaktivt) + Koenzym \longrightarrow Holoenzym (aktivt) \longrightarrow Enzym-/substratkomplex

Andra ämnen kan påverka enzymaktiviteten

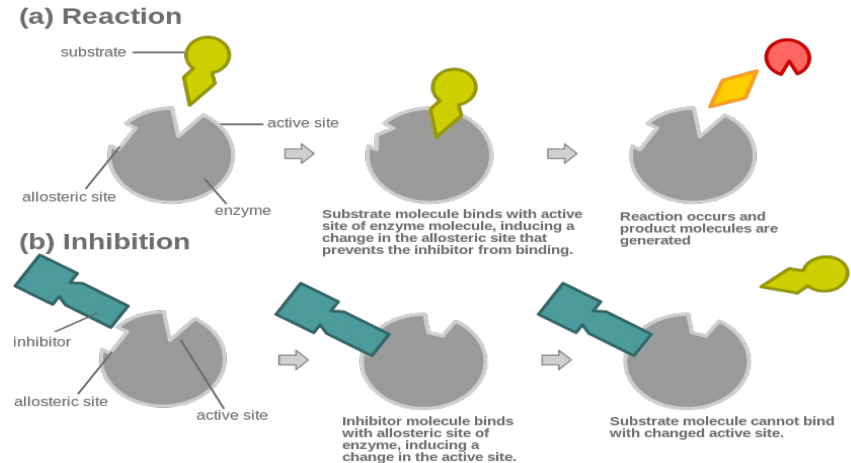
- ✓ **"Inhibitorer"** är molekyler som minskar enzymaktivitet genom att binda till enzymet på ett sådant sätt att substratet/substraten inte kan binda till det aktiva sätet. Många läkemedel och gifter utövar sin funktion genom att fungera som enzym-inhibitorer.

Enzym-inhibition genom att ämnet binder till det aktiva sätet:



Bildkälla: By Mcy jerry at the English language Wikipedia, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=7701646>

Enzym-inhibition genom att ämnet binder till en annan del av enzymet men ändå påverkar det aktiva sätet:



Bildkälla: By Comp_inhib.svg: *SVG version: Srhat (talk · contribs) PNG version: Jerry Crimson Mann at en.wikipedia Later version(s) were uploaded by IMeowbot, Magnus Manske at en.wikipedia. derivative work: Mcstrother (talk) - Comp_inhib.svg, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=11917069>

**DET VIKTIGASTE FRÅN:
BLOCK 2, DEL 2**

Reaktionstyper

- ✓ **Substitutionsreaktion:** Vid en substitutionsreaktion byts en atom eller en atomgrupp i en molekyl ut mot en annan atom eller atomgrupp.



- ✓ **Additionsreaktion:** Vid en additionsreaktion adderas en molekyl till en annan molekyl som från början har en eller flera dubbel- eller trippelbindningar.



- ✓ **Eliminationsreaktion:** Vid en eliminationsreaktion avskiljs två atomer eller atomgrupper från en molekyl vilket ger upphov till en dubbel- eller trippelbindning.



Reaktionstyper

- ✓ **Kondensationsreaktion:** Vid en kondensationsreaktion binds två molekyler samman under avspjälkning av en vattenmolekyl.



- ✓ **Hydrolysreaktion:** Vid en hydrolysreaktion sönderdelas ett ämne under upptagning av vatten.



- ✓ **Syra-basreaktioner (protolysreaktioner):** Vid en syra-basreaktion överförs minst en vätejon (proton, H⁺) från ett ämne (en syra) till ett annat ämne (en bas).

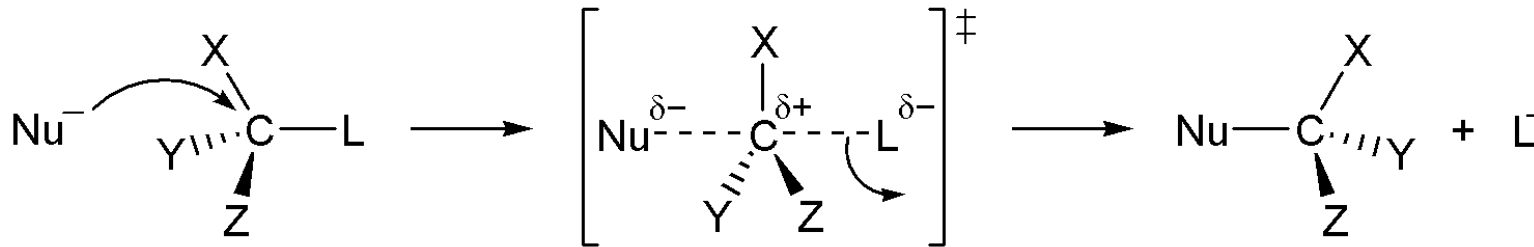


- ✓ **Redoxreaktioner:** Vid en redoxreaktion överförs minst en elektron, fullständigt eller partiellt, från ett ämne till ett annat ämne.



Vad menas med reaktionsmekanismer?

- ✓ **En reaktionsmekanism beskriver stegvis** hur en viss kemisk reaktion går till. Många kemiska reaktioner sker nämligen i flera små steg (delreaktioner) innan de slutgiltiga produkterna bildas.
- ✓ **Reaktionsmekanismen innefattar hur de kemiska bindningarna** förändras (vilka gamla bindningar som bryts i reaktanterna och vilka nya som skapas) och hur övergångstillståndet/det aktiverade komplexet uppstår inkl. dess sammansättning/struktur. Reaktionsmekanismen visar till sist vilka de slutgiltiga produkterna är, inkl. deras struktur, samt hur dessa uppstår.



Reaktionsmekanism för en substitutionsreaktion

Nukleofiler, elektrofiler och karbokatjoner

- ✓ **Nukleofil ("kärnälskare"):** Nukleofiler är ämnen (molekyler eller joner) som attraheras av positiv laddning. Nukleofiler har minst ett fritt elektronpar (alt. en dubbel eller trippelbindning) och är också ofta negativt laddade p.g.a. att de har fått ett elektronöverskott. Det fria elektronparet kan de använda för att "attackera" och skapa bindningar till fullständigt eller partiellt positivt laddade ämnen, s.k. elektrofiler.

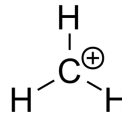
Exempel på nukleofiler: OH^- (syreatomen) H_2O (syreatomen) NH_3 (kväveatomen) Cl^-

- ✓ **Elektrofil ("elektronälskare"):** Elektrofiler är ämnen (molekyler eller joner) som attraheras av negativ laddning. De attraheras av ämnen som har fria elektroner och extra mycket om ämnet har ett elektronöverskott så att en negativ laddning uppstår. Elektrofilerna består av eller innehåller atomer som är fullständigt eller partiellt positivt laddade eftersom atomerna har fått ett elektronunderskott.

Exempel på elektrofiler: H^+ HBr (vätet) CH_3Cl (kolet)

OBS: Vissa ämnen kan fungera som både nukleofiler och elektrofiler eftersom olika atomer i molekylen kan ha olika egenskaper.

- ✓ **Karbokatjon:** En karbokatjon är en positivt laddad jon med laddningen koncentrerad på en kolatom. Karbokationer uppkommer som intermediärer (övergångsprodukter/mellansteg) i organiska reaktioner. De är mycket reaktiva p.g.a. den starka positiva laddningen och har därför väldigt kort livstid. Karbokationer kan fungera som elektrofiler eftersom de har en positivt laddad kolatom.



Substitutionsreaktioner

- ✓ **Vad menas med en substitutionsreaktion?:** Vid en substitutionsreaktion byts en atom eller en atomgrupp i en molekyl ut mot en annan atom eller atomgrupp.
- ✓ **Nukleofil substitutionsreaktion:** Vid en nukleofil substitutionsreaktion är den ena reaktanten en nukleofil och utför en nukleofil attack på den andra reaktanten (elektrofilen).
- ✓ **Exempel på en nukleofil substitutionsreaktion (en S_N1 -reaktion):**



Halogenalkanen 2-klor-2-metylpropan reagerar med en hydroxidjon och bildar alkoholen 2-metyl-2-propanol (i en S_N1 -reaktion).

- ✓ **Exempel på en nukleofil substitutionsreaktion (en S_N2 -reaktion):**



Halogenalkanen klormetan reagerar med en hydroxidjon och bildar alkoholen metanol (i en S_N2 -reaktion).

Sammanfattning av S_N1 och S_N2-reaktioner

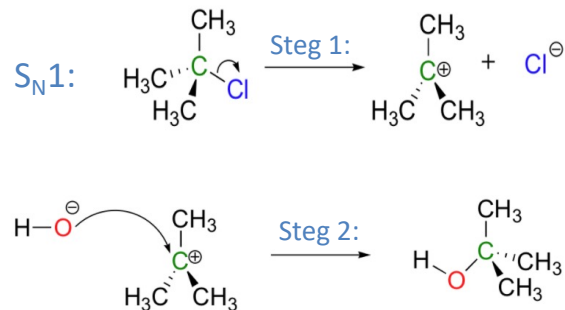
S_N1-reaktioner:

S_N: Nukleofil substitutionsreaktion (S = Substitutionsreaktion, N = Nukleofil attack).

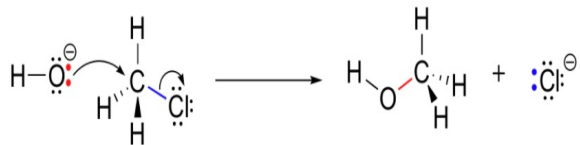
1: Detta är en s.k. monomolekylär reaktion där enbart den ena av de två reaktanterna (ej nukleofilen) deltar i det hastighetsbestämmande första reaktionssteget (totalt är det två reaktionssteg vid en S_N1-reaktion).

Reaktionsmekanism: Reaktionen sker i 2 steg. I steg 1 lossnar den lämnande gruppen (halogenen) i form av en negativ jon och det skapas en karbokation, i steg 2 attackerar nukleofilen karbokationen och skapar en bindning.

När sker S_N1?: S_N1 sker framförallt när det är ett tertiärt kol.



S_N2:



S_N2-reaktioner:

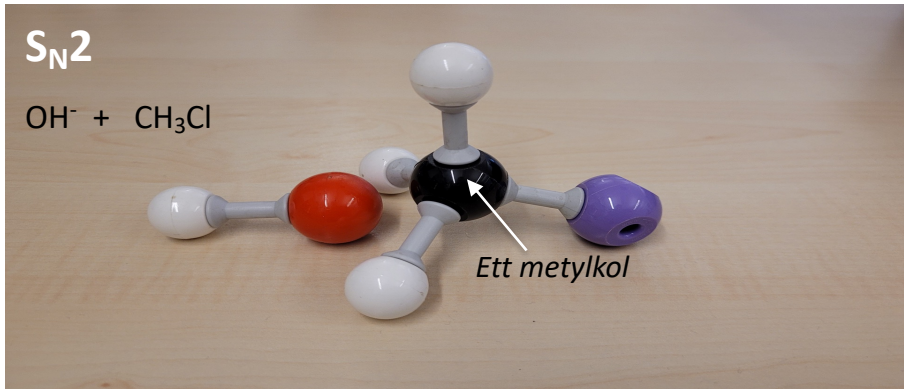
S_N: Nukleofil substitutionsreaktion (S = Substitutionsreaktion, N = Nukleofil attack).

2: Detta är en s.k. bimolekylär reaktion där båda reaktanterna deltar i det hastighetsbestämmande reaktionssteget (vilket också är det enda reaktionssteget som sker vid en S_N2-reaktion).

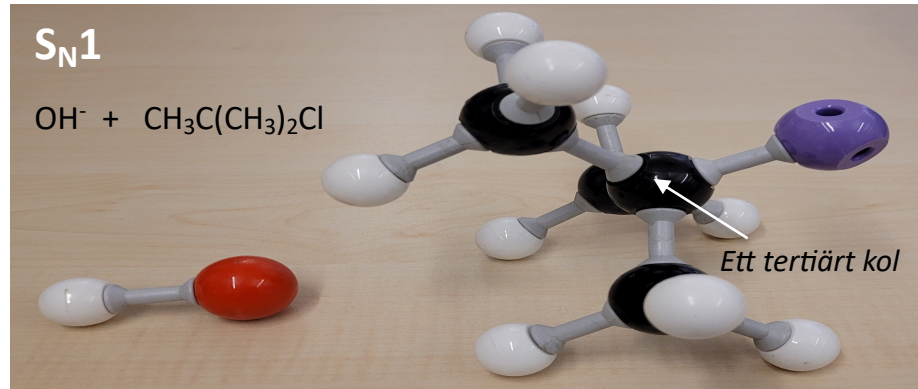
Reaktionsmekanism: Reaktionen sker i 1 steg. Nukleofilen attackerar elektrofilen (halogenalkanen) bakifrån och börjar skapa en bindning, samtidigt som den lämnande gruppen (halogenen) lossnar fram till i form av en negativ jon.

När sker S_N2?: S_N2 sker framförallt när det är ett metylkol eller ett primärt kol.

Jämförelse mellan S_N2 och S_N1



- Sker främst på metylkol eller primära kol p.g.a. litet steriskt hinder, vilket innebär att nukleofilen (OH⁻) kan attackera den partiellt positiva kolatomen i halogenalkanen utan att den lämnande gruppen (halogenen) behöver lossna först.
- Reaktionen sker i ett enda steg; de nya bindingarna börjar skapas samtidigt som de gamla börjar lossna.
- Båda reaktanterna reagerar i det första (och enda reaktionssteget) vilket innebär att koncentrationen av båda reaktanterna påverkar reaktionshastigheten. Ökar vi koncentrationen av någon av reaktanterna så kommer fler krockar ske mellan de båda reaktanterna per tidsenhet vilket ökar reaktionshastigheten.



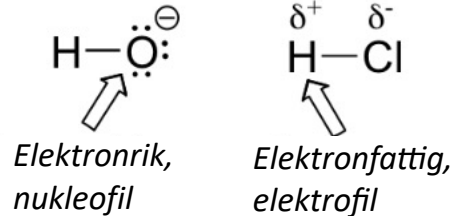
- Sker främst på tertiära kol eftersom S_N2 inte kan ske på tertiära kol p.g.a. stort steriskt hinder.
- I denna reaktion måste den lämnande gruppen (halogenen) först lossna för att öppna upp molekylen och minska det steriska hindret. I nästa steg kan sedan den nukleofila attacken ske (på den uppkomna karbokationen).
- Reaktionen sker alltså i två steg, varav det första steget är mycket långsammare än det andra steget.
- Enbart den ena reaktanten (halogenalkanen) reagerar i det första och hastighetsbestämmande steget, vilket innebär att det är enbart koncentrationen av den reaktanten (ej nukleofilen) som påverkar reaktionshastigheten.

Reaktionsmekanismen bakom en syra-basreaktion (liknar en S_N2-reaktion)

Reaktion:



Förutsättningar:



I molekylen HCl är Cl elektronegativ och drar åt sig bindningselektronerna som den delar med väteatomen. Detta gör att klor blir partiellt negativt laddat och väte partiellt positivt laddat. OH⁻ är en kraftig nukleofil (kärnalskare) eftersom den dels är en negativt laddad jon och dels har fria elektronpar på syreatomen.

Reaktionsmekanism:

Vi har ett **aktiverat komplex** precis när bindningen mellan H och Cl börjar brytas, och en ny börjar skapas mellan O och H.

1. Syreatomen gör, med ett av sina fria elektronpar, en **nukleofil attack** på vätet, en bindning börjar skapas.

3. Cl lämnar i form av en kloridjon och en vattenmolekyl bildas.



2. När syret börjar skapa en bindning till vätet, blir det för mycket elektroner runt vätet. Bindningselektronerna mellan H och Cl repelleras och förskjuts fullständigt till Cl.

Additionsreaktioner

- ✓ **Vad menas med en additionsreaktion?:** Vid en additionsreaktion reagerar två (eller ibland flera) molekyler med varandra och bildar en större molekyl. Den ena molekylen har från början minst en dubbel- eller trippelbindning (är omättad) och därför kan den andra molekylen adderas till denna molekyl. Det är elektronerna i dubbel- eller trippelbindningen som skapar bindningarna till atomerna i den andra molekylen. Polyaddition innebär att många små molekyler (monomerer) med dubbelbindningar länkas samman till stora molekyler (polymerer).
- ✓ **Elektrofil addition:** Reaktionen innefattar att ett ämne som fungerar som en elektrofil (elektronälskare) adderas till en dubbel- eller trippelbindning på en annan molekyl.

- ✓ **En alken reagerar med en vätehalogenid (vätehalid) och bildar en halogenalkan (alkylhalogenid):**



- ✓ **En alken reagerar med vatten och bildar en alkohol:**



- ✓ **En alken reagerar med en halogen och bildar en halogenalkan (alkylhalogenid):**



OBS: Summaformler!

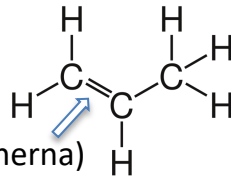
En alken reagerar med en vätehalogenid och bildar en halogenalkan: Additionsreaktionen mellan propen och vätebromid

Reaktionsformeln:



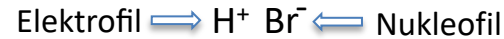
Förutsättningar:

Propen



Nukleofil (pi-elektronerna)

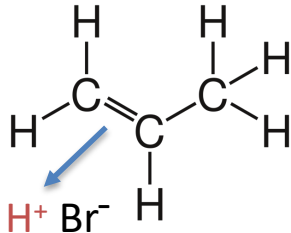
Vätebromid (joner i löst form)



Reaktionsmekanismen:

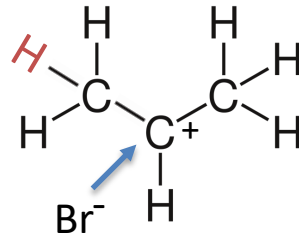
1. En karbokation bildas: Dubbelbindningens pi-elektroner attackerar och skapar en bindning till protonen/vätejonen från vätebromid. En karbokation uppstår då.
2. En nukleofil attack sker på karbokationen: Bromidjonen gör en nukleofil attack på karbokationen och en bindning skapas till den positiva kolatomen.

Propen



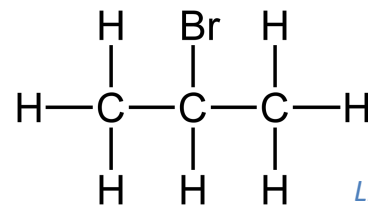
Vätebromid (i löst form)

Karbokation (sekundär)



Bromidjon

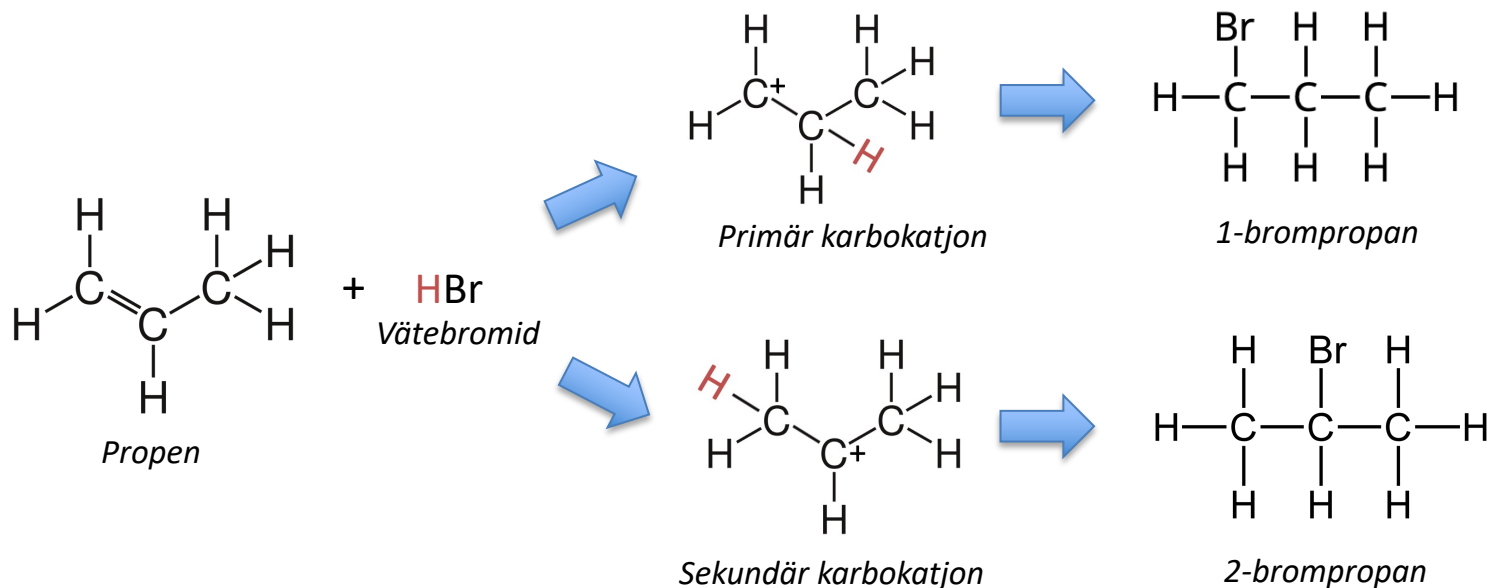
2-bromopropan



Liten blå pil visar hur elektronerna rör sig

Två olika produkter kan bildas i teorin

- ✓ När propen reagerar med vätebromid kan i teorin både 2-brompropan och 1-brompropan bildas. Anledningen är att två olika karbokationer kan bildas i det första steget beroende på vilken av kolatomerna, vid dubbelbindningen, som vätet binder till. Om t.ex. vätet binder till kolatom nr. 2 så kommer bromidjonen binda till kolatom nr. 1 (och tvärtom). **OBS:** I praktiken bildas dock nästan uteslutande 2-brompropan.

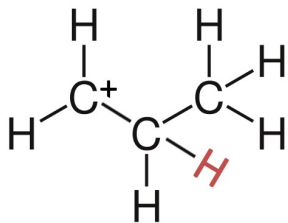


I praktiken är det nästan uteslutande 2-brompropan som bildas!

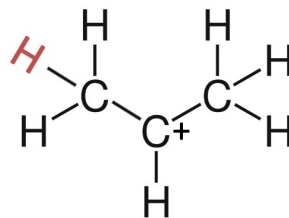
Regioselektivitet: Reaktionen ger endast en produkt, istället för att ge olika produkter.

Varför bildas nästan enbart 2-brompropan?

- ✓ **Sekundära karbokationer är mer stabila/mindre reaktiva än primära** (och tertiära är mer stabila än både sekundära och primära). Det krävs därför mindre aktiveringsenergi för sekundära karbokationer att bildas, och det är därför större sannolikhet att dessa bildas. Därför kommer det att bildas nästan enbart 2-brompropan vid addition av vätebromid till propen.



Primär karbokation



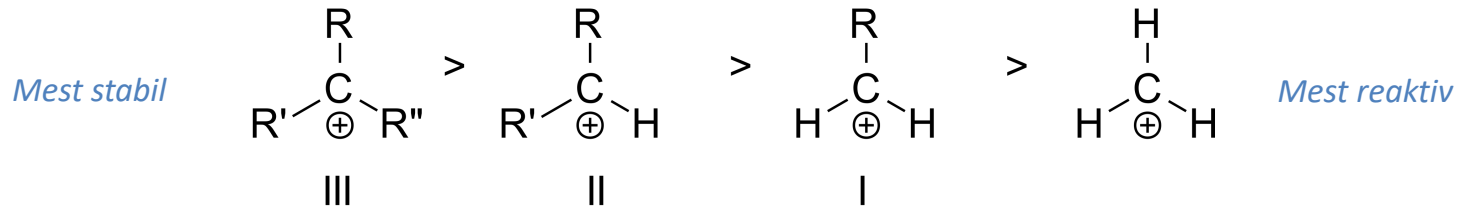
Sekundär karbokation

Markovnikovs regel och stabiliteten av karbokationer

✓ Markovnikovs regel:

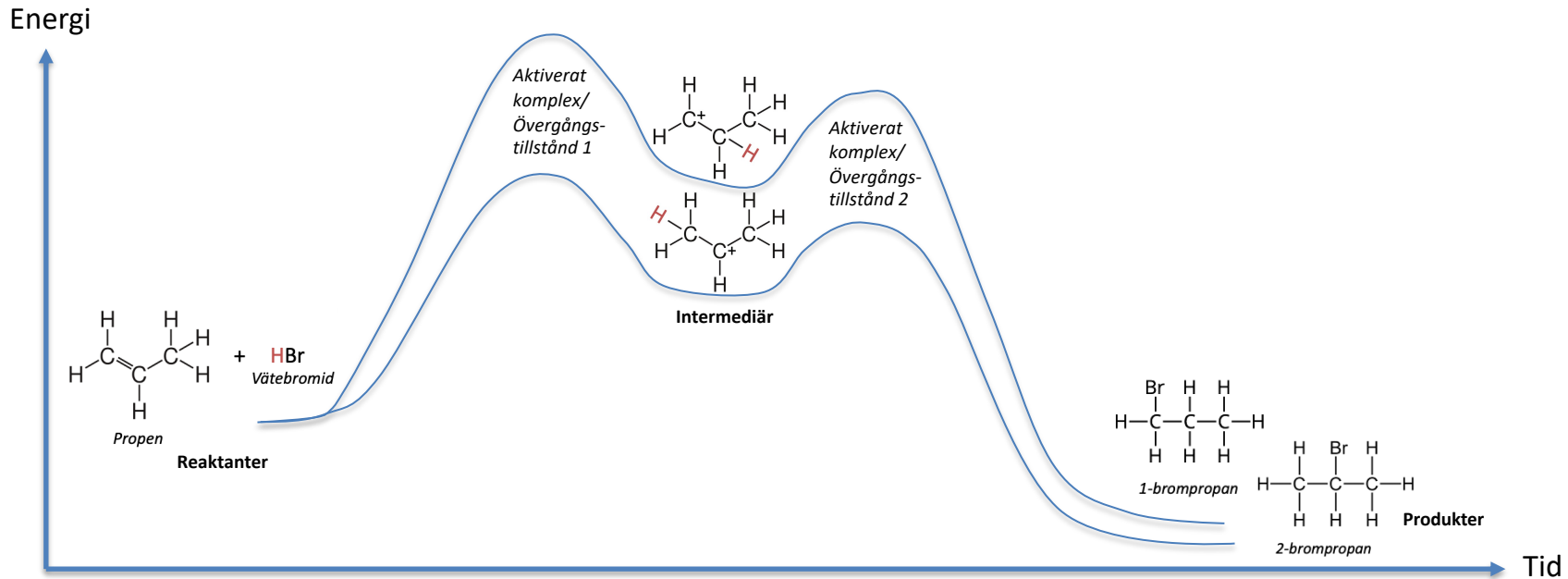
- Den ryske kemisten Vladimir Markovnikov undersökte en mängd additionsreaktioner och formulerade en regel; Vid addition av en vätehalogenid/vätehalid eller av vatten till en alken kommer vätet hamna på den kolatom vid dubbelbindningen som redan binder flest antal väten (halogenen, eller OH-gruppen om det gäller vatten, hamnar därför på den kolatom vid dubbelbindningen som binder minst antal väten).
- Markovnikovs regel lite annorlunda uttryck; Vid addition av en vätehalogenid/vätehalid eller av vatten till en alken kommer vätet placeras på den plats som ger upphov till den mest stabila karbokationen.

✓ Stabiliteten av karbokationer:



Desto fler alkylgrupper (kolvätegrupper) som binder den positiva kolatomen, desto stabilare karbokation eftersom kolatomen har fler "kompisar" som kan låna ut sina elektroner så att den positiva laddningen fördelas ut på fler atomer!

Energidiagram över additionsreaktionen mellan propen och vätebromid



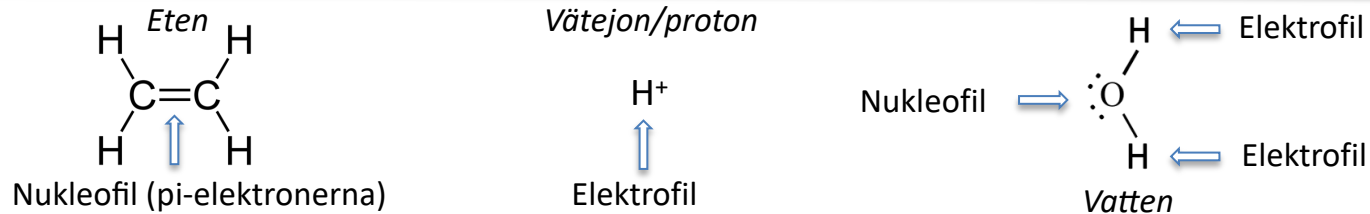
- Det krävs mycket mer aktiveringsenergi för att bilda en primär karbokation som intermediär jämfört med en sekundär och därför bildas nästan bara sekundära karbokationer. Produkten blir därför nästan uteslutande 2-bromopropan.

En alken reagerar med vatten och bildar en alkohol:

Additionsreaktionen mellan eten och vatten



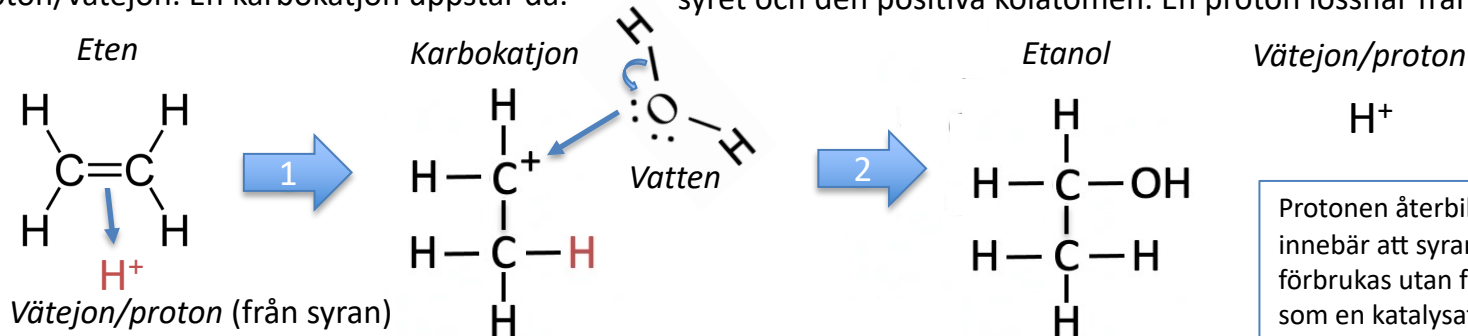
Förutsättningar:



Reaktionsmekanismen:

1. En karbokation bildas: Dubbelbindningens pi-elektroner attackerar och skapar en bindning till en proton/vätejon. En karbokation uppstår då.
2. En nukleofil attack sker på karbokationen: Vattenmolekylen gör en nukleofil attack på karbokationen och en bindning skapas mellan syret och den positiva kolatomen. En proton lossnar från vattnet.

Liten blå pil visar hur elektronerna rör sig



Protonen återbildas vilket innebär att syran inte förbrukas utan fungerar som en katalysator.

En alken reagerar med en halogen och bildar en halogenalkan: Reaktionen mellan 2,3-dimetyl-2-buten och brom

Reaktionsformeln:

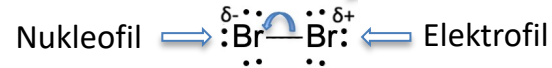
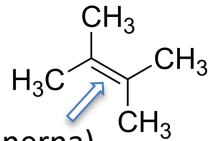


OBS: Summaformler!

Förutsättningar:

2,3-dimetyl-2-buten

Brom



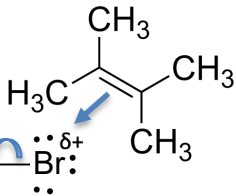
OBS: Brom polariseras när den närmar sig dubbelbindningen i alkenen.

Reaktionsmekanismen:

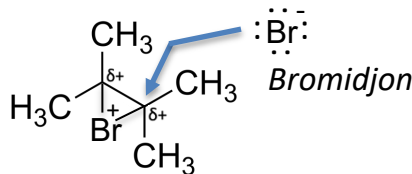
1. En bromoniumjon bildas: Dubbelbindningens pi-elektroner polariserar brommolekylen, attackerar och skapar en bindning till den främre bromatomen. Den bakre släpper då i form av en bromidjon. En bromoniumjon uppstår.
2. En nukleofil attack sker på bromoniumjonen: Bromidjonen gör en nukleofil attack på bromoniumjonen. Detta sker på "baksidan" och på en av kolatomerna vid den tidigare dubbelbindningen.

Liten blå pil visar hur elektronerna rör sig

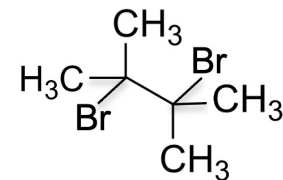
2,3-dimetyl-2-buten



Bromoniumjon



2,3-dibrom-2,3-dimetylbutan



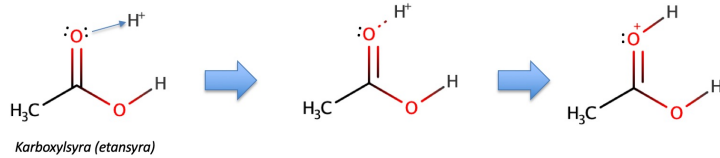
En ester kan bildas i en kondensationsreaktion mellan en karboxylsyra och en alkohol

- ✓ **Kondensationsreaktioner:** Vid en kondensationsreaktion slås två molekyler samman och bildar en större molekyl, samtidigt som vatten spjälkas av.
- ✓ **Estrars kondensationsreaktioner:** Vid kondensationsreaktionen mellan en karboxylsyra och en alkohol bildas en ester. För att reaktionen ska kunna ske behöver vi ha en stark syra (ofta koncentrerad svavelsyra) som katalysator.
- ✓ **Här ser vi kondensationsreaktionen mellan etansyra och metanol:**

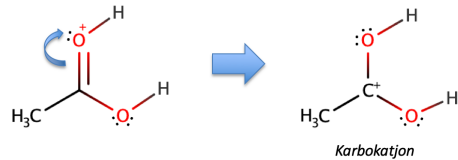


Esterreaktionen kan delas in i 5 steg:

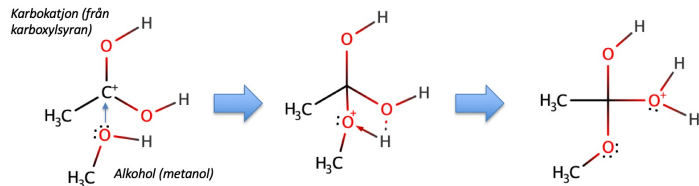
1. Karboxylsyran binder en proton:



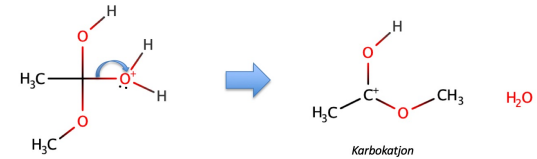
2. Karboxylsyran omvandlas till en karbokation:



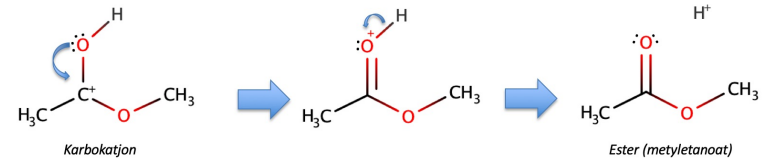
3. Alkoholmolekylen gör en nukleofil attack på karbokationen och en protonöverföring sker:



4. En vattenmolekyl avspjälkas:



5. En proton lossnar (katalysatorn återbildas) och vi har då fått vår färdiga ester:



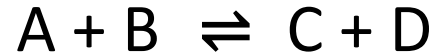
Reaktionsformeln:



**DET VIKTIGASTE FRÅN:
BLOCK 2, DEL 3**

Vad innebär en jämviktsreaktion och vad innebär kemisk jämvikt?

- ✓ **Jämviktsreaktion:** En jämviktsreaktion är en reaktion som kan gå i båda riktningarna (reversibel reaktion) och där reaktionen går lika fort åt båda hållen efter att jämvikt har ställt in sig.

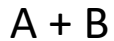
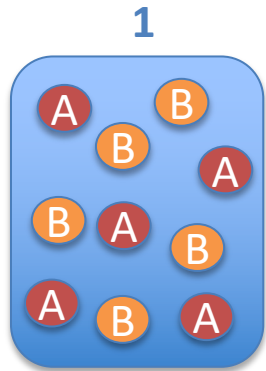


- ✓ **Kemisk jämvikt:** Kemisk jämvikt innebär att en jämviktsreaktion har nått ett tillstånd där reaktionen går lika fort åt båda hållen. Med lika fort menas att koncentrationen av de ingående ämnena inte längre förändras.

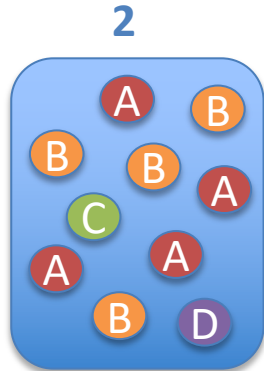
OBS: Koncentrationerna av de olika ämnena behöver dock inte vara lika stor på båda sidor vid jämvikt.

- ✓ **Höger- eller vänsterförskjuten:** I början av en kemisk reaktion (innan jämvikt har nåtts) är nettoreaktionen alltid förskjuten åt antingen vänster eller höger. Det betyder att reaktionen går fortast åt antingen vänster eller höger. Anledningen kan vara;
 - att koncentrationen, i början av reaktionen, är högre av de ämnen som är på den ena sidan (eller att det inte finns någonting alls av ämnena på den andra sidan) och därför har de lättare att reagera med varandra.
 - att vissa ämnen (p.g.a. struktur och kemiska egenskaper) har lättare att reagera med varandra.

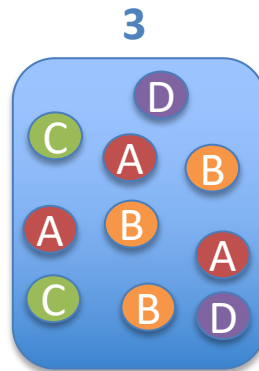
En jämviktsreaktion steg för steg



Vi tillsätter ämne A och B i en bägare med vatten. Ämnena A och B börjar krocka med varandra.



Ämnena C och D börjar bildas. Reaktionen kan bara gå åt höger eftersom det till en början inte finns något av ämnena C och D. Reaktionen är alltså högerförskjuten vid starten.



Nu börjar det bli tillräckligt med C och D, vilket innebär att de också börjar krocka med varandra och börjar bilda ämnena A och B. Ämne C och D har dock (i det här exemplet) svårare att reagera med varandra än vad ämne A och B har. Det krävs därför en ganska stor koncentration av ämne C och D innan reaktionen börjar ta fart åt vänster.



Nu sker inte längre någon förändring av de olika ämnens koncentrationer eftersom reaktionen åt vänster går lika fort som reaktionen åt höger. Det krävdes dock en större konc. av C och D innan reaktionerna fick samma hastighet. **Kemisk jämvikt har uppnåtts!**

Obs: Vid jämvikt behöver inte konc. av ämnena vara lika höga.

Vad innebär jämviktskonstanten?

- ✓ **Jämviktskonstanten:** Vid jämvikt har reaktionen stabiliserats (reaktionen går nu lika fort åt båda hållen) och vi har fått en bestämd koncentration av de ingående ämnena. Jämviktskonstanten (K) visar koncentrationsförhållandet (eller kvoten) mellan ämnena på höger resp. vänster sida vid jämvikt. Den är alltid densamma för en viss reaktion vid en viss temperatur.
- ✓ **Hur jämviktskonstanten beräknas:** Om vi tar koncentrationerna av ämnena till höger och delar med koncentrationerna av ämnena till vänster så får vi jämviktskonstanten (K).



- ✓ **Vad innebär en hög jämviktskonstant?:** Om K är högt innebär det alltså att vi vid jämvikt har mycket av ämnena till höger och lite av ämnena till vänster. Ett högt K -värde avslöjar därför att ämnena till vänster har lättare att reagera med varandra än vad ämnena till höger har. Reaktionen går alltså lättast åt höger, innan jämvikten ställer in sig. Reaktionen eller jämviktsläget är alltså förskjutet åt höger (högerförskjuten reaktion). Vi får därför en högre koncentration till höger jämfört med till vänster vid jämvikt och därför blir värdet på K högt.

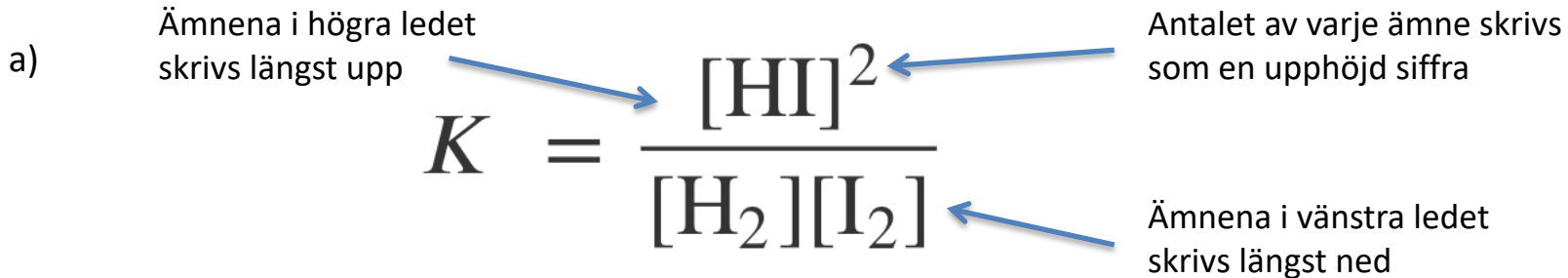
Uppgift 1:

Betrakta följande jämviktsreaktion: $\text{H}_2 + \text{I}_2 \rightleftharpoons 2\text{HI}$

a) Teckna jämviktsekvationen för reaktionen

b) Är reaktionen vänster- eller högerförskjuten om jämviktskonstanten har ett högt värde?

Lösning:



b) En hög jämviktskonstant innebär att vi vid jämvikt har hög koncentration av ämnet i det högra ledet (HI) och låg koncentration av ämnena i det vänstra ledet (H_2 och I_2). Ämnena till vänster har alltså lätt för att reagera med varandra och därför bildas det mycket av ämnet till höger. Man säger därför att reaktionen är högerförskjuten (att den innan jämvikt går mest åt höger).

Jämviktskonstanten kan ha olika enheter



- ✓ Jämviktskonstanten "K" visar alltså koncentrationsförhållandet mellan ämnena på höger och vänster sida vid jämvikt. Koncentrationen mäts vanligtvis i enheten molar (M) som är samma sak som mol/dm³.
- ✓ Enheten för K är dock inte alltid M utan kan även betecknas t.ex. M⁻², M⁻¹ eller t.o.m. vara enhetslös. Vi tar jämviktsekvationen från föregående uppgift som exempel:

$$K = \frac{0,081 \text{ M}}{(0,028 \text{ M} \cdot 0,021 \text{ M})} \approx 1,4 \cdot 10^2 \text{ M}^{-1} \quad \rightarrow \quad \frac{\cancel{M}}{\cancel{M} \cdot \cancel{M}} = \text{M}^{-1}$$

Koncentrationskvoten, Q , avslöjar om jämvikt har uppnåtts

- ✓ **Ett system i jämvikt:** Om ett system (en reaktion) är i jämvikt så förändras inte de olika ämnens koncentrationer, utan de är konstanta. Om systemet inte är i jämvikt så kommer reaktionen fortsätta ända tills den når jämvikt.
- ✓ **Koncentrationskvoten (Q):** Koncentrationskvoten (Q) visar koncentrationsförhållandet (eller kvoten) mellan ämnena på höger resp. vänster sida om reaktionspilarna (oavsett om reaktionen har uppnått jämvikt eller inte).
- ✓ **Varför beräknar man koncentrationskvoten?:** För att testa om ett system (en reaktion) är i jämvikt kan man beräkna kvoten mellan de olika ämnens koncentrationer, alltså koncentrationskvoten, Q . Q beräknas på exakt samma sätt som jämviktskonstanten, K , men när vi först beräknar denna koncentrationskvot så kan vi inte kalla kvoten för jämviktskonstanten, K , eftersom vi inte vet om systemet är i jämvikt. Om systemet är i jämvikt är koncentrationskvoten, Q , densamma som jämviktskonstanten, K . Om värdet däremot skiljer sig åt, så är systemet inte i jämvikt. Se tabellen till höger.

$$Q = K$$

Systemet befinner sig i jämvikt.

$$Q \neq K$$

Systemet befinner sig inte i jämvikt.

$$Q < K$$

Nettoreaktionen går åt höger i reaktionsformeln.

$$Q > K$$

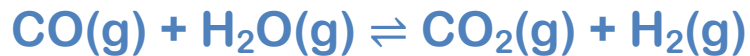
Nettoreaktionen går åt vänster i reaktionsformel.

Uppgift 1:

I en behållare med temp. 500 grader finns fyra gaser i lika koncentrationer (0,010 M). Systemets jämviktskonstant, K , är 5,9 och ämnena reagerar med varandra enligt följande; $\text{CO}(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \rightleftharpoons \text{CO}_2(\text{g}) + \text{H}_2(\text{g})$.

- a) Beräkna koncentrationskvoten, Q , för att se om systemet är i jämvikt.
- b) Om systemet inte är i jämvikt så bestäm åt vilket håll, höger eller vänster i reaktionsformel, nettoreaktionen kommer fortsätta för att uppnå jämviktsläget.

a) Beräkna koncentrationskvoten, Q , för att se om systemet är i jämvikt



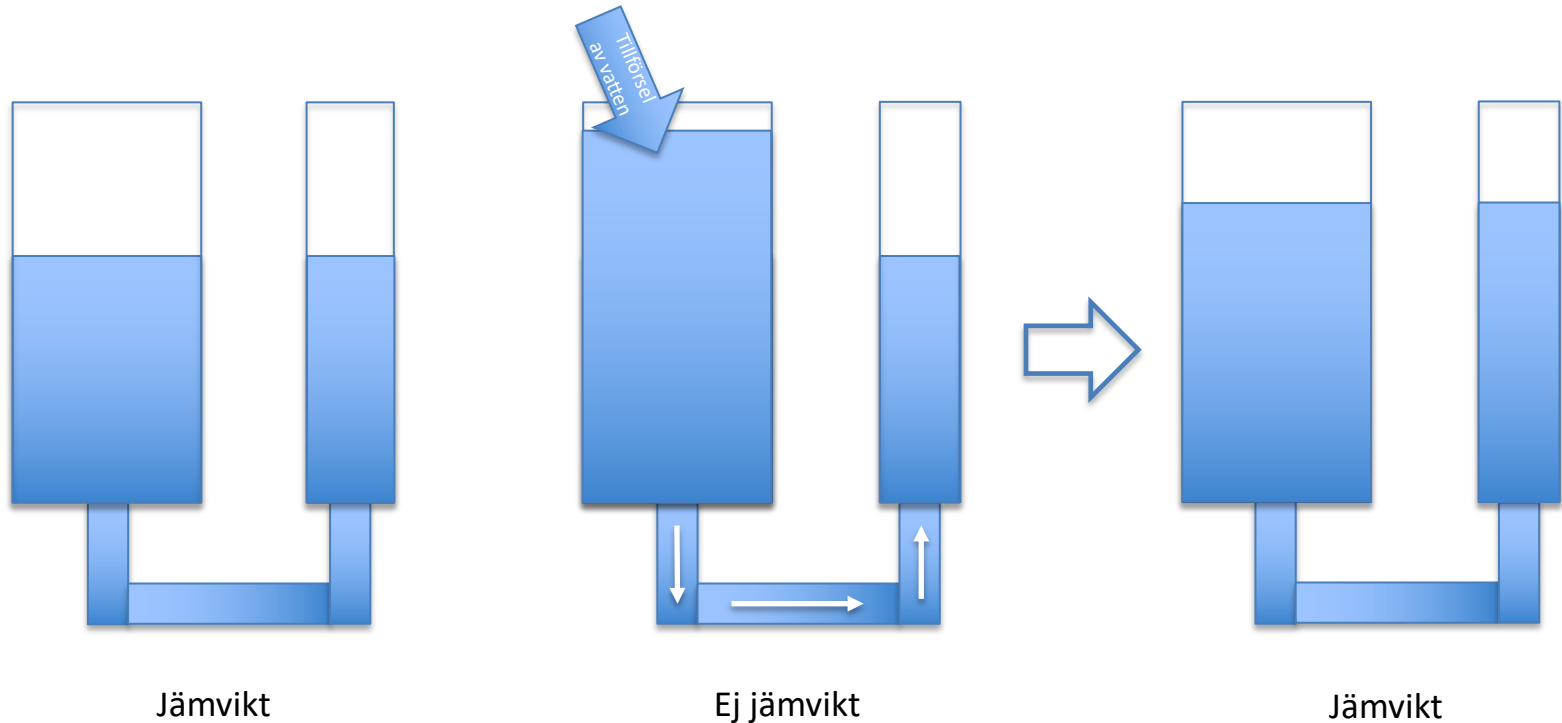
Lösning:

- ✓ Vid 500 grader är systemets jämviktskonstant (K) 5,9. Om systemet har uppnått jämvikt så ska alltså koncentrationskvoten mellan ämnena på höger resp. vänster sida bli 5,9.
- ✓ När vi beräknar kvoten med de givna koncentrationerna kan vi inte kalla kvoten för jämviktskonstanten (K) eftersom vi inte vet om systemet är i jämvikt. Därför kallar vi den för koncentrationskvoten (Q) så länge.
- ✓ Vi sätter in koncentrationerna och beräknar Q :

$$Q = \frac{[\text{CO}_2] \cdot [\text{H}_2]}{[\text{CO}] \cdot [\text{H}_2\text{O}]} = \frac{(0,010 \text{ M} \cdot 0,010 \text{ M})}{(0,010 \text{ M} \cdot 0,010 \text{ M})} = 1,0 \quad \Rightarrow \quad Q < K = \text{Ej jämvikt}$$

Svar: Vi ser att Q har ett lägre värde än K ($1,0 < 5,9$) och därför är systemet inte i jämvikt.

Vad händer om man stör ett jämviktssystem?



Le Chateliers princip: Om man förändrar något i ett jämviktssystem förskjuts jämvikten så att förändringen motverkas.

Om man förändrar något i ett jämviktssystem förskjuts jämvikten så att förändringen motverkas

	Förskjuter jämvikten?:	Ändrar värdet på K ?:	Förklaring:
Koncentrationsförändring:	Ja	Nej	Om vi ökar koncentrationen av en eller flera ämnen i ett jämviktssystem så kommer reaktionen förskjutas åt det håll som medför att koncentrationsskillnaden avtar och jämvikten ställer in sig igen. Värdet på K förändras dock inte eftersom förhållandet/kvoten mellan ämnena på vänster resp. höger sida inte förändras.
Tryckförändring:	Ja	Nej	Om vi t.ex. ökar det omgivande trycket i ett jämviktssystem, genom att minska volymen av reaktionskärlet, så kommer reaktionen förskjutas åt det håll som innebär att det bildas färre partiklar och därmed lägre tryck. Värdet på K förändras dock inte eftersom förhållandet/kvoten mellan ämnena på vänster resp. höger sida inte förändras.
Temperaturförändring:	Ja	Ja	Om den omgivande temperaturen förändras i ett jämviktssystem så rubbas jämvikten. Om t.ex. temperaturen ökar så kommer jämviktsreaktionen förskjutas åt det håll som leder till att temperaturökningen motverkas (åt det "endoterma hållet"). En ny jämvikt kommer ställa in sig. Kvoten mellan ämnena på de båda sidorna, och därmed jämviktskonstanten, K , kommer då ha förändrats.
Tillförelse av en katalysator:	Nej	Nej	Om en katalysator, t.ex. ett enzym, tillsätts till ett jämviktssystem, kommer reaktionen snabbare nå jämvikt (katalysatorn ökar reaktionshastigheten), men jämviktsläget och jämviktskonstanten påverkas inte. Enzymet kan påskynda reaktionen i båda riktningarna, men påverkar inte förhållandet/kvoten mellan ämnena.

OBS: Endast temperaturen kan ändra värdet på K för en specifik reaktion.

Uppgift 1:

Fosgen är en otrevlig gas som har använts som stridsgas. Den kan framställas genom att kolmonoxid får reagera med klorgas:




Vi har en behållare på $10,0 \text{ dm}^3$. Vid jämvikt har vi $0,28 \text{ mol CO}$, $0,21 \text{ mol Cl}_2$ och $0,81 \text{ mol COCl}_2$. Vilket är värdet på jämviktskonstanten?

Lösning:

1) Ställ upp jämviktsekvationen:

$$K = \frac{[\text{COCl}_2]}{[\text{CO}][\text{Cl}_2]}$$

2) Gör en tabell med alla kända värden och beräkna konc. vid jämvikt: 

	CO(g)	+	Cl ₂ (g)	⇌	COCl ₂ (g)
n (vid jämvikt) =	0,28 mol		0,21 mol		0,81 mol
V =	10,0 dm ³		10,0 dm ³		10,0 dm ³
c (vid jämvikt) =	$n/V = 0,28/10,0 = 0,028 \text{ M}$		$n/V = 0,21/10,0 = 0,021 \text{ M}$		$n/V = 0,81/10,0 = 0,081 \text{ M}$

3) Sätt in koncentrationerna i

jämviktsekvationen och räkna ut K : 

$$K = \frac{0,081 \text{ M}}{(0,028 \text{ M} \cdot 0,021 \text{ M})} = 137,755102 \text{ M}^{-1} \approx 1,4 \cdot 10^2 \text{ M}^{-1}$$

Svar: Värdet på K är $1,4 \cdot 10^2 \text{ M}^{-1}$.


Uppgift 2:

Kolmonoxid kan reagera med vatten vid en viss temperatur. Då bildas koldioxid och vätgas enligt följande: $\text{CO(g)} + \text{H}_2\text{O(g)} \rightleftharpoons \text{CO}_2\text{(g)} + \text{H}_2\text{(g)}$. För den här reaktionen är jämviktskonstanten $K = 5,0$. Vid jämvikt hade man 0,060 mol koldioxid, 0,030 mol vatten och 0,090 mol vätgas i ett kärl med volymen 1,00 dm³. Vilken var koncentrationen kolmonoxid?


Lösning:

- 1) Ställ upp jämviktsekvationen:

$$K = \frac{[\text{CO}_2] [\text{H}_2]}{[\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}]}$$

- 2) Gör en tabell med alla kända värden och beräkna konc. vid jämvikt: 

	CO(g)	+	H ₂ O(g)	⇌	CO ₂ (g)	+	H ₂ (g)
n (vid jämvikt) =	y mol		0,030 mol		0,060 mol		0,090 mol
V =	1,00 dm ³		1,00 dm ³		1,00 dm ³		1,00 dm ³
c (vid jämvikt) =	x M		$c = n/V =$ 0,030/1,00 = 0,030 M		$c = n/V =$ 0,060/1,00 = 0,060 M		$c = n/V =$ 0,090/1,00 = 0,090 M

- 3) Sätt in jämviktskonstanten och de kända koncentrationerna i jämviktsekvationen och beräkna konc. kolmonoxid: 

$$5,0 = \frac{0,060 \text{ M} \cdot 0,090 \text{ M}}{x \text{ M} \cdot 0,030 \text{ M}} \quad \text{blue arrow} \quad x = 0,036 \text{ M}$$

Svar: Koncentrationen kolmonoxid var 0,036 M.


Uppgift 3:

Vätgas kan reagera med jodgas och bilda vätejodid: $\text{H}_2 + \text{I}_2 \rightleftharpoons 2\text{HI}$
En behållare på $1,0 \text{ dm}^3$ fylldes med $0,72 \text{ mol}$ vätgas och $0,52 \text{ mol}$ jodgas.
Vid jämvikt fanns det $0,92 \text{ mol}$ vätejodid. Vilken är jämviktskonstanten för reaktionen?

Lösning:

- 1) Ställ upp jämviktsekvationen:

$$K = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]}$$

- 2) Gör en tabell med alla kända värden och beräkna konc. vid jämvikt: 

- 3) Sätt in koncentrationerna i jämviktsekvationen och beräkna K :

$$K = \frac{(0,92 \text{ M})^2}{(0,26 \text{ M} \cdot 0,06 \text{ M})} \approx 54$$

	H_2	+	I_2	\rightleftharpoons	2HI
Mf =	1		1		2
n (vid start) =	0,72 mol		0,52 mol		0,00 mol
n (förändring) =	-0,46 mol		-0,46 mol		+0,92 mol
n (vid jämvikt) =	$0,72 - 0,46 = 0,26 \text{ mol}$		$0,52 - 0,46 = 0,06 \text{ mol}$		0,92 mol
V =	$1,0 \text{ dm}^3$		$1,0 \text{ dm}^3$		$1,0 \text{ dm}^3$
c (vid jämvikt) =	$c = n/V = 0,26/1,0 = 0,26 \text{ M}$		$c = n/V = 0,06/1,0 = 0,06 \text{ M}$		$c = n/V = 0,92/1,0 = 0,92 \text{ M}$

Svar: Jämviktskonstanten är 54.