

Ordliste

Aktiveringsenergi: Energien som kreves for å få et molekyl eller ion til å reagere.

Bølgelengde: Avstanden mellom to topper eller to daler i en elektromagnetisk bølge.

Endoterm: En reaksjon som må tilføres energi utenfra.

Eksoterm: En reaksjon som frigjør energi.



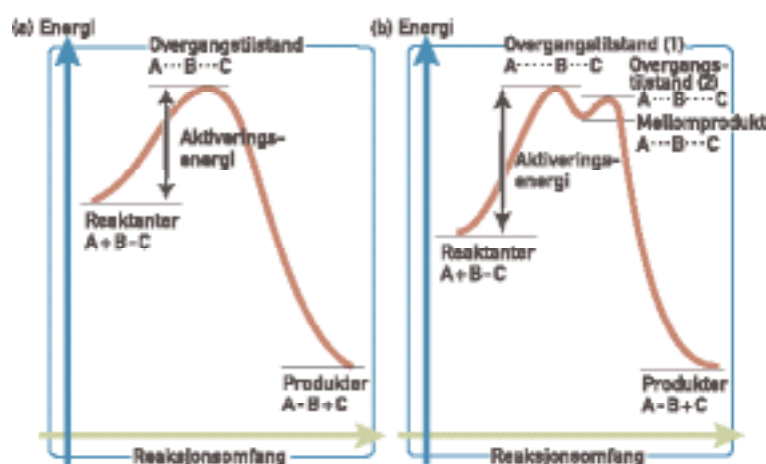
Foto: Per Wangen, Statoil.



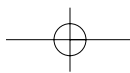
Reaksjonsprofilen

På bare noen få tiår har forskerne gjort store fremskritt innen området reaksjonsdynamikk. Dette gjør det mulig å følge selv de raskeste kjemiske reaksjonene og faktisk observere mellomstadiene mellom reaktanter og produkter. Ved å studere overgangstilstanden, som er den høyeste energitilstanden de reagerende molekylene eller atomene må passere, kan kjemikerne blant annet få innsikt i detaljer som: a) hvorledes de reagerende molekylene nærmer seg hverandre b) hvordan bindinger brytes og dannes, og c) hvordan produktene beveger seg bort fra hverandre etter reaksjonen. Noen ganger dannes et svært reaktivt mellomprodukt under reaksjonsforløpet. Forskjellen mellom et mellomprodukt og et overgangsstadium er at stoffene i mellomproduktet kan eksistere i en lavere energitilstand, fremstilt i en reaksjonsprofil som en lavere «energigrop», mens stoffene i overgangstadiet befinner seg på det høyeste energinivået. Se figur 1.

I de fleste kjemiske reaksjonene er energien til produktene lavere enn for reaktantene, det vil si at reaksjonen er **eksoterm**. Men uansett om en har en eksoterm eller **endoterm** reaksjon så eksisterer det en energibarriere som må overvinnes. Denne energibarrieren kalles **aktiveringsenergien** og ligger på et høyere energinivå enn både reaktantene og produktene. Reaktantene må tilføres denne energimengden for eksempel ved en varmeprosess eller med elektromagnetisk stråling (lys) for at en reaksjon i det hele tatt kan finne sted. Hvordan denne aktiveringsenergien vekselvirker med reaktantene, og hvilke energiformer en får etter den kjemiske reaksjonen, er to sentrale spørsmål kjemikerne er opptatt av når de studerer reaksjonsforløp.



Figur 1. To mulige reaksjonsprofiler for en eksoterm reaksjon $A + B - C \rightarrow A - B + C$. (a) viser en enkeltrinns reaksjon mens (b) viser en reaksjon med et mellomprodukt $A \cdots B \cdots C$ (som eksisterer i «gropen» på toppen av reaksjonsprofilen).



Kan vi se kjemiske reaksjoner?

Foton: En «pakke» av elektromagnetisk stråling.

Fotosyntese: Syntesen av karbohydrater i grønne planter av karbondioksid og vann med sollys som energikilde.

Frekvens: Antall vibrasjoner per sekund i elektromagnetisk stråling.

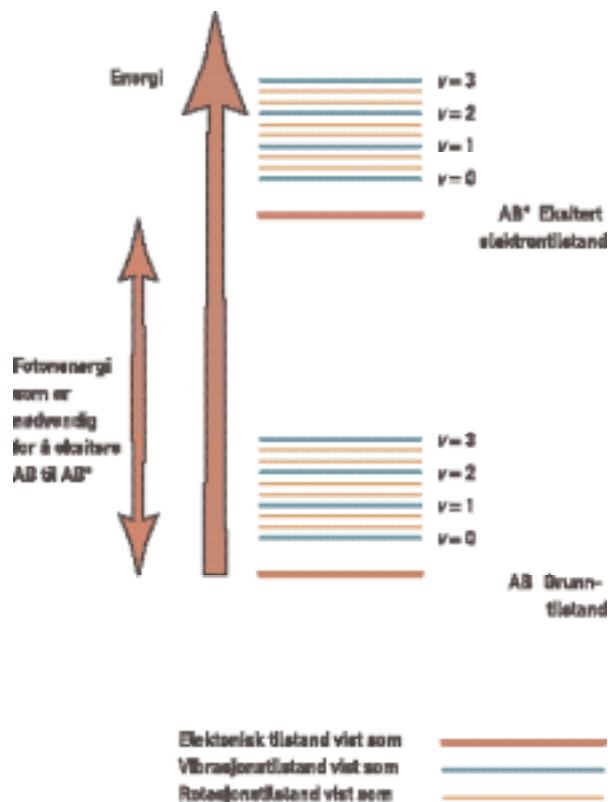
Orbital: Et område rundt atomkjernen der en kan finne et elektron, eller sagt på en annen måte: Orbital er en

«bølgefunksjon», en matematisk funksjon som forteller oss hvor stor sannsynligheten er for å finne et elektron i hvert punkt i rommet rundt atomkjernen.

Spektroskopi: Måling av elektromagnetisk stråling som sendes ut eller absorberes av kjemiske stoffer.



79



Figur 2. Energinivåer i grunntilstanden til et toatomig molekyl og i den eksiterte tilstanden.

Spektroskopi

Et molekyls indre energi er fordelt mellom molekylets forskjellige **elektronorbitaler** og vibrasjons- og rotasjons-tilstanden til de kjemiske bindingene. I følge kvantemekanikken, teorien for molekyler, atomer og subatomære partikler, kan energien bare innta bestemte diskrete verdier. Dette gir opphav til mange energinivåer for elektronene og for vibrasjons- og rotasjonsenergien. Forskjellen mellom to naboenerginivåer tilsvarer et kvant av elektromagnetisk energi. Energien (E) til kvantet er knyttet til **frekvens** ν via formelen $E=h\nu$, der h er Plancks konstant, som er $6,6 \cdot 10^{-34}$ Js.

Hvert elektronnivå har mange vibrasjons- og rotasjonsnivåer knyttet til seg, se figur 2. Vanligvis befinner et molekyl AB seg i sitt laveste energinivå, også kalt grunntilstanden, men kan eksiteres til et høyere energinivå AB^* ved at det absorberer et **foton** av elektromagnetisk stråling med passende frekvens (eller **bølgelengde**). For å eksitere orbitalnivåene, trengs høyenergetisk ultrafiolett eller synlig lys, mens absorpsjon av mer lavenergetisk (lenger bølgelengde) infrarød eller mikrobølgestråling er nok til å eksitere vibrasjons- og rotasjonsnivåene. Når et molekyl har kommet i eksitert tilstand, kan det falle tilbake til et lavere energinivå, eller til grunntilstanden ved utsendelse av elektromagnetisk stråling.

Alle molekylene har sin unike måte å oppta og avgi energi

på. Dette betyr at et molekyls absorpsjonsspekter (mønster av bølgelengder de absorberer) og emisjonsspekter (mønster av bølgelengder et eksitert molekyl utstråler) kan brukes til å identifisere molekylet. Spekteret kan også brukes til å kartlegge den kjemiske strukturen eller å måle konsentrasjonen. Moderne **spektroskopi** er virkelig et nyttig analytisk verktøy når en skal studere kjemiske reaksjoner.

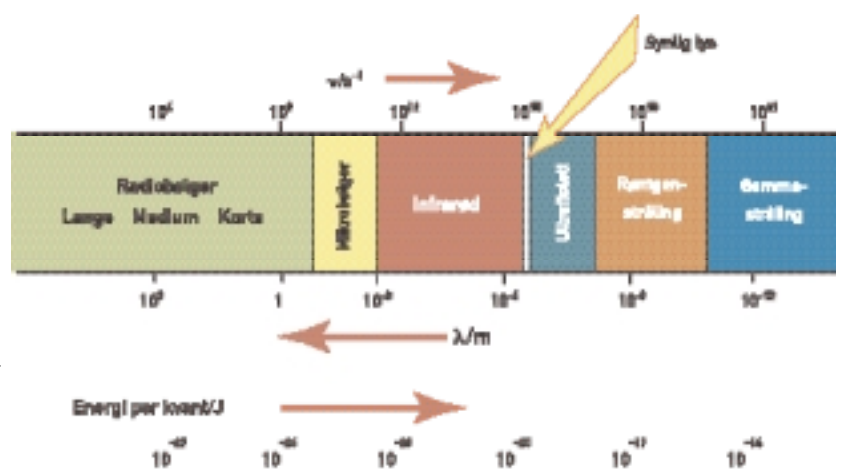
Sammenhengen mellom energien (E), frekvensen (ν) og bølgelengden (λ) til forskjellige typer elektromagnetisk stråling kan uttrykkes med likningene

$E = h\nu$ og $c = \nu\lambda$, der λ er bølgelengden og c er lyshastigheten, cirka 3×10^8 m s^{-1} i vakuum, som vist i figur 3.

Skal det skje en reaksjon, må molekylet absorbere tilstrekkelig energi, ikke bare for å eksitere det til et høyere energinivå, men også for å plukke det fra hverandre (dissosiasjon). Mange reaksjoner kan derfor utløses av lys. Den resulterende elektronforflytningen gir nye bindinger og følgelig nye molekyler.

- 1. Kovalent** bindingsenergi er 400 kJ/mol for et stoff. Dette er energien for ett mol bindinger. Hva blir energien for bare én binding? Hva blir frekvensen for den tilsvarende elektromagnetiske strålingen? I hvilket område av det elektromagnetiske spekteret ligger denne frekvensen?

Spektroskopi kan brukes til å identifisere ustabile molekyler som eksisterer under de ulike trinn i denne prosessen. Dersom det brukes gjennom mange tidsintervaller, kan spektroskopi også nyttes til å registrere forandring i konsentrasjonen til de ulike kjemikalietyper. Dermed kan en måle hvor hurtig en reaksjon går, det vil si reaksjonshastigheten. Dette kalles reaksjonskinetikk.



Figur 3. Det elektromagnetiske spekteret som viser sammenhengen mellom frekvens, bølgelengde og energi per kvant.