

## Theoretische Grundlagen

Grün sind die Gleichungen für den NumericSolver (Ti89, Voyage 200) eingefügt

Wo kommt Chemie vor:

- Alltag
- Sport
- Medizin
- Technik
- Kunst
- Natur
- Weltall

### Atombau

- Kernteilchen (Protonen, Neutronen)
- Hülle (Elektronen, Energiestufen, Orbitale)
- Grösse der Atome ca. 0,1 nm

$$E = m \cdot c^2$$

$$\text{Schalenbesetzung: } z = 2 \cdot n^2$$

Aussenlektronen/Valenzelektronen

$$\text{Lichtgeschwindigkeit: } 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$e_j = m_{kg} \cdot c_{licht}^2$$

$$e_{kwh} = m_{kg} \cdot c_{licht}^2 / (3600000.)$$

$$n = m / M : n : \text{Anzahl Mole}$$

m : Masse in g

M : Molmasse in g/mol

$$n_{mol} = m_g / mol_g$$

$$N = N_A \cdot n : N : \text{Anzahl Teilchen}$$

$N_A$ : Loschmidtsche Zahl  $6.023 \cdot 10^{23}$

$$c = n / V : c : \text{Konzentration mol/l; } M \text{ (molar)}$$

V : Volumen l

$$c_{mol} = m_g / mol_g / v_l$$

### Strahlenarten

- $\alpha$ -Strahlen:  ${}^4_2\text{He}$
- $\beta$ -Strahlen:  $e^-$
- $\gamma$ -Strahlen: elektromag. Strahlen

Altersbestimmungen (HWZ,  ${}^{14}_6\text{C}$ ,  ${}^3_1\text{H}$ )

Faustregel: wie gefährlich sind Strahlen

- kBq      klein
- MBq      mässig
- GBq      giftig
- TBq      tödlich

$$N(t) = N_0 \cdot 10^{-(0,693 \cdot t / \text{HWZ})}$$

HWZ: Halbwertszeit

$N_0$ : Anzahl Teilchen zur Zeit  $t=0$

$N(t)$ : Anzahl Teilchen zur Zeit t

$$nt = n_0 \cdot 2^{(-zeit/hwz)}$$

Für chemische Reaktionen mit exponentieller Abnahme:

$$c(t) = c(0) \cdot e^{(-k \cdot t)}$$

$c(t)$ : Konzentration zur Zeit  $t$

$c(0)$ : Konzentration zur Zeit  $t=0$

$k$ : Reaktionsgeschwindigkeitskonstante

$$ct = c_0 \cdot e^{(-0.693/hwz\_sec \cdot t\_sec)}$$

$$ct = c_0 \cdot e^{(-krg \cdot t\_sec)}$$

$krg$ : Reaktionsgeschwindigkeitskonstante

**Mathematisches Ausgleichen** von Reaktionsgleichungen:

Gleichungssystem aufstellen; auflösen.

Es gehen nie!!!! Atome verloren.

### Stöchiometrie

- Die Summe der Atome ist auf beiden Seiten einer Reaktionsgleichung gleich
- Molmassen
- Dreisätze mit Reaktionsgleichungen

### PSE

- Aufbau
- Schalen
- Eigenschaften

### Aufbau von Verbindungen:

Die Atome möchten in ihrer Hülle wie ein Edelgas aussehen (2 e, meist 8 e, Oktettregel.)

**Die Natur ist ökonomisch**, sie versucht mit einem Minimum an Energie auszukommen → möglichst wenig Elektronen austauschen.

Aus der Anzahl Aussenelektronen leitet sich die **Wertigkeit** ab.

### Elektronegativität

Polarität von Verbindungen

Bindungsarten

### Bindungsarten (intramolekular)

	Metall	Nichtmetall
Metall	Metallbindung	Ionenbindung
Nichtmetall	Ionenbindung	Elektronenpaarbindung

- Intermolekulare Bindungen:
- Wasserstoffbrückenbindung (ca. 20kJ)
- Dipol-Dipol-Bindung (ca. 10 kJ)
- Van der Waals'sche Bindung (ca. 5 kJ)

### Eigenschaften der Verbindungen

- Ionenverbindungen (Salze)
- Metallverbindungen (incl. Legierungen)
- Elektronenpaarbindungen (Moleküle, Gitter)

### Chemische Formeln

Art der Elemente Verhältnisse der Elemente	x					Verhältnisformel Elementarformel
Grösse der Moleküle (nicht Atom- oder Ionenkristalle)	x	x				Molekularformel Summenformel
Bindungen zwischen den Elementen (Elektronenstrich-Formel)	x	x	x			Konstitutionsformel
Zweidimensionale Anordnung (auch Z und E)	x	x	x	x		Konfiguration (Strukturformel)
Dreidimensionale Anordnung (auch Chiralität)	x	x	x	x	x	Konformation, Niggli-Formel

Die stabilsten Moleküle sind die *symmetrischsten*.

**VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) – Modell (EPA-Modell; Elektronen-Paar-Abstossung):**

Die Elektronenpaare stoßen sich in diesen Verbindungen sehr stark ab, sie versuchen also maximalen Abstand zu erreichen. (2 neg. Bereiche → 180°, 3 neg. Bereiche → 120°, 4 neg. Bereiche → 109°; Tetraeder)

→ **Räumliche Anordnungen der Atome**

**Radioaktivität**

α-Strahlen : Energie MeV (1 MeV = 6,24·10<sup>9</sup> kJ)

β-Strahlen : Energie MeV

γ-Strahlen : Energie keV (1 keV = 6,24·10<sup>6</sup> kJ)

**UV - Strahlen**

$E = 1,19687 \cdot 10^5 / \lambda$ ; E in kJ/mol, λ in nm

UV-Strahlen 200 - 400 nm haben eine Energie von 600 - 300 kJ/mol

**Sichtbares Licht**

420 – 700 nm : 285 – 171 kJ/mol

**Thermische Energie**

1 Mol eines Stoffes hat bei 24°C die thermische Energie von ca. 3,7 kJ

**Plancksches Strahlungsgesetz:**  $E = h \cdot \nu$ ;

$h = 6,6 \cdot 10^{-34}$  Js

ν: Frequenz Hz, 1/s

$e_j = h_{\text{planck}} \cdot \text{freq\_hz}$

**Je weisser, desto heisser!!**

Thermodynamische Temperatur:

$T = \vartheta + 273,15$  (K);  $\vartheta$  : Temp. in °C

**Allgemeine Gasgleichung**

$p \cdot V / T = n \cdot R$

R : allg. Gaskonstante [8.31441 m<sup>3</sup> Pa/K Mol]

n : Anzahl Mole

$p_{\text{pa}} \cdot v_{\text{m}^3} = n_{\text{mol}} \cdot r_{\text{gas}} \cdot \text{temp\_k}$

Bei Normalbedingungen hat 1 Mol, jedes!! Gases ein Volumen von 22.4 Litern!

Bei Standardbedingungen (20°C): 24.6 Liter

Beim Verdampfen einer Flüssigkeit nimmt das Volumen um den Faktor 100 – 1000 zu.

$p = \Delta c \cdot R \cdot T$  : osmotischer Druck einer Lösung

Δc: Konzentrationsdifferenz in mol/m<sup>3</sup> !!

$p_{\text{pa}} = \Delta c_{\text{m}^3} \cdot r_{\text{gas}} \cdot \text{temp\_k}$

Diffusionsgeschwindigkeit

$t = d^2/D$

t: Diffusionszeit (s)

d: Diffusionsdistanz (m)

D: Diffusionskonstante (m<sup>2</sup>/s)

$t_{\text{sec}} = d_{\text{m}}^2 / \text{diffkon}$

**Chemie ein Spiel der Atome und Moleküle mit elektrischen Ladungen (Austausch, Anziehung, Abstossung)  
Jedes Atom möchte eine Aussenschale haben, wie das nächstliegende Edelgas.**

Enthält eine Verbindung Elemente mit einer ungewöhnlichen Oxidationszahl, oder Elemente, die bis zur Edelgashülle nur noch wenige Elektronen benötigen oder zu viel haben, so sind diese **chemisch reaktiv** und damit oft auch **gefährlich**.

Sprengstoffe enthalten sowohl Oxidations- wie Reduktionsmittel.

Kommen mehr als 2 Atome in einem Molekül vor, dann gilt für die Bestimmung der Oxidationszahl das **Prinzip "des wilden Westens"**.

### Redoxreaktionen

- Oxidation: wird positiver
- Reduktion: wird negativer
- Elektrolysen
- Normalpotentiale (Spannungen von Batterien)

Energie: Sind die Produkte polarer als die Edukte, dann ist die Reaktion exotherm, es wird heiss und  $\Delta H < 0$  (mit  $\Delta EN$  abschätzen).

$$\Delta H^\circ = \sum \Delta H_f^\circ(\text{Produkte}) - \sum H_f^\circ(\text{Edukte})$$

$$\Delta H^\circ = - \sum (\text{Bindungsenergien});$$

Je mehr Energie in der Bindung steckt, desto stabiler ist die Verbindung.

**Satz von Hess:** Auch mit Umwegen kann keine Energie gespart werden !!

Beim absoluten Nullpunkt hat ein ideales Gitter eine maximale Ordnung (keine Bewegung, man weiss immer genau, wo sich jedes Atom befindet), die **Entropie S = 0** (Definition).

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \cdot \Delta S^\circ : \text{Gibbs- Helmholtz- Gleichung}$$

$$dg_0 = dh_0 - temp\_k \cdot ds_0$$

$\Delta G^\circ$  : Freie Reaktionsenthalpie [kJ]

$\Delta H^\circ$  : Reaktionsenthalpie [kJ]

$\Delta S^\circ$  : Reaktionsentropie [J/K] !!

T : Thermodyn. Temperatur [K]

Selbständig laufen nur Reaktionen, deren  $\Delta G < 0$  ist.

$\Delta G$  ist die Energie, die in der Lage ist Arbeit zu leisten ( $\Delta S$  kann das nicht!!).

	$\Delta S < 0$	$\Delta S > 0$
$\Delta H < 0$	$\Delta G < 0$ , falls $T < \Delta H / \Delta S$	$\Delta G < 0$ , für alle Temperaturen
$\Delta H > 0$	$\Delta G < 0$ , für keine Temperatur	$\Delta G < 0$ , falls $T > \Delta H / \Delta S$

### Elektrolyse

$$I = m \cdot z \cdot NA \cdot q_e / (M \cdot t)$$

$$m = I \cdot M \cdot t / (z \cdot NA \cdot q_e);$$

$$F = NA \cdot q_e$$

$$m = I \cdot M \cdot t / (z \cdot F);$$

I: Stromstärke A

m: Masse kg

z: Ladung des Ions

M: Molmasse kg/mol

T: Zeit s

F =  $9.684 \cdot 10^4$  C/mol (Faraday'sche Konstante)

NA =  $6,022 \cdot 10^{23}$  mol<sup>-1</sup>

q<sub>e</sub> =  $1.602 \cdot 10^{-19}$  C

1 J =  $2.72 \cdot 10^{-7}$  kWh

$$m\_g = i\_a \cdot \text{mol\_g} \cdot t\_s / (z \cdot \text{fkonst})$$

$$w\_j = u\_v \cdot n\_mol \cdot z \cdot \text{fkonst}$$

$$W = I \cdot t \cdot U = U \cdot Q; Q = n \cdot z \cdot F = U \cdot m / M \cdot z \cdot F$$

W: Arbeit J  
 U: Spannung V  
 Q: Ladung C  
 N: Anzahl Mole mol

$$w_{\text{kwh}} = u_{\text{v}} \cdot m_{\text{g/mol}} \cdot g_{\text{z}} \cdot \text{ion} \cdot f_{\text{konst}} / 3600000$$

### Nernstsche Gleichung

$$E = E^{\circ} + \frac{2.3 \cdot R \cdot T}{z \cdot F} \log K \quad \text{für } 20^{\circ}\text{C} \quad E = E^{\circ} + \frac{0.058}{z} \log \frac{c_{\text{ox}}}{c_{\text{red}}}$$

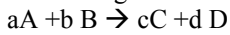
z: Ladung des Ions  
 K: Gleichgewichtskonstante  
 R: allg. Gaskonstante

$$e_{\text{c}_v} = e_0_{\text{v}} + r_{\text{gas}} \cdot \text{temp}_k / (z_{\text{ion}} \cdot f_{\text{konst}}) \cdot \ln(\text{k}_{\text{gg}})$$

$$e_{\text{c}_v} = e_0_{\text{v}} + r_{\text{gas}} \cdot \text{temp}_k / (z_{\text{ion}} \cdot f_{\text{konst}}) \cdot \ln(c_{\text{ox}} / c_{\text{red}})$$

### Reaktionsgeschwindigkeit = Stoffumsatz pro Zeit $v = \Delta c / \Delta t$

Reaktionsgeschwindigkeit v:



$$v = k \cdot [A]^a \cdot [B]^b$$

k: Reaktionsgeschwindigkeitskonstante (ist substanz- und temperaturabhängig)

[A]: Konzentration der Substanz A in mol/l

[B]: Konzentration der Substanz B in mol/l

**Reaktionsgeschwindigkeit** ist abhängig von:

- Der Konzentration (Anzahl Teilchen pro Volumen)
- Der Oberfläche (Ecken, Kanten, Flächen)
- Dem Druck (Anzahl Teilchen pro Volumen)
- Der Temperatur (Anzahl Zusammenstöße pro Zeit, Energie der Zusammenstöße)
- Der Beweglichkeit (Grösse der Teilchen, Form, Verbindung mit dem Lösungsmittel)
- Der Geometrie (wirksame Treffer, wirksame und hindernde Molekülteile)

Ordnung einer Reaktion:

- Man bezeichnet eine Reaktion, die unabhängig von der Konzentration des reagierenden Stoffes ist als Reaktion **0.Ordnung**.
- Eine Reaktion deren Reaktionsgeschwindigkeit proportional einer vorhandenen Konzentration ist, wird mit **1.Ordnung** bezeichnet.
- Eine Reaktion, bei welcher ein Stoff (B) in grossem Überschuss vorhanden ist, sodass nur der andere Stoff (A) eine Rolle spielt, kann sich als 1.Ordnung zeigen – man nennt dies **pseudo-1.Ordnung** ( $A + B \rightarrow C$ ). Die Konzentration von B ist dabei praktisch konstant. (Diese Vereinfachung ist experimentell sehr wichtig)

**RGT-Regel, Van't Hoffsche Regel:** Die Reaktionsgeschwindigkeit einer chemischen Reaktion ist bei einer Temperaturerhöhung um 10 °C etwa zwei (bis drei) mal grösser ( $Q_{10} = 2-3$ ).

$$k_{\text{rg}} = \text{konst} \cdot 2^{(d\text{temp}/10)}$$

$$k_{\text{rg}} = \text{konst} \cdot 3^{(d\text{temp}/10)}$$

Diese leitet sich ab aus dem Gesetz von Arrhenius:

$$k = A \cdot e^{-E_a / (R \cdot T)}$$

k: Geschwindigkeitskonstante, 1/s

A: Frequenzfaktor, enthält die Stosszahl z (Reaktivität) und den Orientierungsfaktor P, 1/s

E<sub>a</sub>: Aktivierungsenergie J

R: Allgemeine Gaskonstante J/K

T: Temperatur in Kelvin K

$$k_{\text{rg}} = a \cdot f \cdot e^{(-e_a_j / (r_{\text{gas}} \cdot \text{temp}_k))}$$

$$\text{HWZ} = \ln(2) / k \quad (\text{für } 1. \text{ Ordnung})$$

Ein **Katalysator** ist eine Substanz, welche an der Reaktion teilnimmt, diese beschleunigt, dabei aber nicht aufgebraucht wird (Verringert die Aktivierungsenergie).

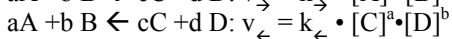
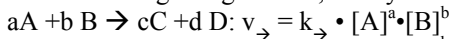


Ein **Stabilisator** hemmt eine Reaktion, ohne dabei aufgebraucht zu werden, es ist eigentlich ein negativer Katalysator. Ein Stabilisator erhöht die Aktivierungsenergie.

**Rückgekoppelte Reaktionen** sind wichtig (Umwelt, Biochemie), das gebildete Produkt oder die umgesetzte Energie hat einen Einfluss auf die Bildung von neuen Produkten.

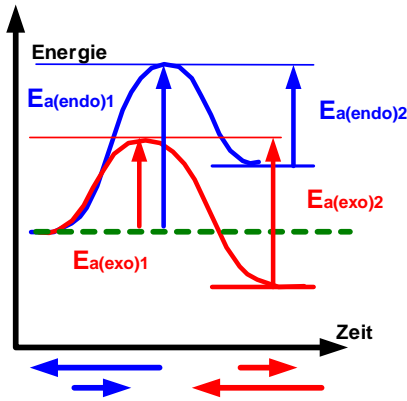
- positive Rückkopplung (zunehmend)
- negative Rückkopplung (stabilisierend)

**MWG:** Fließgleichgewichte, steady state, dynamische Gleichgewichte ( $v_{\rightarrow} = v_{\leftarrow}$ )



$$K = \frac{k_{\rightarrow}}{k_{\leftarrow}} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

$$k_{gg} = \frac{c_c \cdot c_d}{c_a \cdot c_b}$$



Wasser:  $K = \frac{k_{\rightarrow}}{k_{\leftarrow}} = \frac{[H_3O^+ ] \cdot [OH^- ]}{[H_2O]^2} = 3,3 \cdot 10^{-18} \text{ (22}^\circ\text{C)}$

**Prinzip von LeChatelier:** Ein System weicht dem äusseren Zwang aus.

äusserer Einfluss	Gleichgewichtsverschiebung
Druckerhöhung	zu der Seite mit dem kleineren Volumen
Temperaturerhöhung	zu der Seite mit der grösseren Bindungsenergie
Konzentrationserhöhung eines Eduktes Ausgangsstoffes	zu den Produkten
Konzentrationserhöhung eines Produktes Endstoffs	zu den Edukten

**Thermodynamik und Gleichgewicht**

$$\Delta G \gg 0; K \ll 1$$

$$\Delta G \ll 0; K \gg 1$$

**Weber-Fechnersches – Gesetz:**

Unsere Sinnesempfindungen sind logarithmisch.

- Sehsinn (→ Lux)
- Gehör (→ decibel)
- Tastsinn
- Geruch
- Geschmack (→ pH, Scoville..)
- Temperatur

Dieses Gesetz gilt übertragen auch für die Wirkung von Medikamenten und Giften.

Starke Säuren (Basen) reagieren rascher mit unedlen Metallen, als schwache Säuren (Basen). Ein Mass für die Säurestärke ist der pKs-Wert.

**Namen:**

Namen der wichtigsten Säuren, Basen und Salze!!

negativ geladenes Element: ...**id**; Cl<sup>-</sup>: Chlorid, O<sup>2-</sup>: Oxid; N<sup>3-</sup>: Nitrid

Vom Namen des Salzes mit Endung ..at ausgehen:

+ 1 Sauerstoff ...**perat**

normal ...**at**

- 1 Sauerstoff ...**it**

- 2 Sauerstoffe ...**hypo..it**

Wichtig:

Mit einer starken Säure kann aus einem Salz eine schwache Säure freigesetzt werden, nicht aber umgekehrt.

Mit einer starken Base kann aus einem Salz eine schwache Base freigesetzt werden, nie aber umgekehrt.

$K_w = K \cdot [H_2O]^2 = [H_3O^+] \cdot [OH^-] = 10^{-14}$  (22°C); Ionenprodukt des Wassers.

**Säuren** zeichnen sich durch die Bildung von H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> aus, sie sind Protonenspender; Protonendonatoren.

Oft: Nichtmetalloxid + Wasser → Säure

**Definition:**  $pH = -\log [H_3O^+]$ ; diese Definition entspricht der Säureempfindung unserer Zunge.

$pH < 7$ ;  $pH = 7$ ;  $pH > 7$   
sauer    neutral    basisch

**Basen** zeichnen sich durch die Bildung von OH<sup>-</sup> aus, sie sind Protonenfänger oder Protonenacceptoren.

Oft: Metalloxyd + Wasser oder Aminverbindungen + Wasser → Base

$K_w = [H_3O^+] \cdot [OH^-] = 10^{-14}$  (22°); Ionenprodukt

$pK_w = pH + pOH = 14$ ; logarithmische Form des Ionenprodukts.

$K_s = K [H_2O] = [H_3O^+] \cdot [A^-] / [HA]$ ; K<sub>s</sub> : Säurekonstante;  $K_s = 10^{-pK_s}$

$pK_s = -\log (K_s)$ ; Säureexponent, Säurestärke.

$K_b = K [H_2O] = [OH^-] \cdot [HA] / [A^-]$ ; K<sub>b</sub>: Basenkonstante

$pK_b = -\log(K_b)$ : Basenexponent; Basenstärke.

$K_w = K_s \cdot K_b = 10^{-14}$  (22°C)

$pK_w = pK_s + pK_b = 14$  (22 °C)

<b>Säure</b>	stark	schwach
Säurerest, konj. Base	schwach	stark
<b>Base</b>	stark	schwach
Basenrest, konj. Säure	schwach	stark

Salze aus Säuren und Basen:

	Säure	
	stark	schwach
Base		
stark	neutral	basisch
schwach	sauer	neutral

Bestimmungsgleichung für Säuren mit [H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>]

$[H_3O^+]^2 + [H_3O^+] \cdot K_s - c \cdot K_s = 0$ ;

$ch30^2 + ch30 * ks - c\_mol * ks = 0$

Bestimmungsgleichung für Basen mit [OH<sup>-</sup>]

$[OH^-]^2 + [OH^-] \cdot K_b - c \cdot K_b = 0$ ;

$coh^2 + coh * kb - c\_mol * kb = 0$

## pH-Berechnung

vereinfachte Formel:  $\text{pH} = \frac{1}{2} \bullet [\text{pKs} - \lg(c)]$

$$\text{ph} = 1/2 * (\text{pks} - \log(c_{\text{mol}}))$$

Quadratische Formel für Säuren mit pH:

$$(10^{-(\text{ph})})^2 + 10^{-(\text{ph})} * 10^{-(\text{pks})} - c_{\text{mol}} * 10^{-(\text{pks})} = 0$$

Quadratische Formel für Basen mit pOH:

$$(10^{-(\text{poh})})^2 + 10^{-(\text{poh})} * 10^{-(\text{pkb})} - c_{\text{b}} * 10^{-(\text{pkb})} = 0$$

**Puffer (Puffergleichung, Henderson - Hasselbalchsche Gleichung)**

Liegen in einer Lösung eine schwache Säure und deren konjugierte (korrespondierende) Base vor, dann spricht man von einer Pufferlösung.

$$\text{pH} = \text{pKs} + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

[A-]: Base oder korrespondierende Base

[HA]: Säure oder korrespondierende Säure

$$\text{ph} = \text{pks} + \log(c_{\text{a}}/c_{\text{ha}})$$

**Organische Chemie**

- Isomerien
- Benennung
- Funktionelle Gruppen
- Farben (konj. DB)
- Makromoleküle: Cellulose, Stärke, Proteine
- Kunststoffe

**Eigenschaften von Verbindungen:**

→ für eine unbekannte Substanz herleiten:

- physikalisch (Eigenschaften)
- chemisch (Aufbau, reaktiv, lipophil, hydrophil)
- physiologisch (Wirksamkeit, Stoffwechsel)
- ökologisch (Verhalten, Akkumulation, Abbaubarkeit)

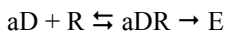
**Biochemie**

Wichtige Strategien

- Die Natur arbeitet ökonomisch
- „Der Stärkere gewinnt“
- Erfolgreiche Moleküle/Molekülteile sind weit verbreitet
- Serielle Prozesse in Kanälen (Enzymketten, „Fließband“)
- Regelungen mit Rückkopplungen (z.B. Endprodukthemmung..)
- Scale free Netzwerke
  
- Aminosäuren
- Neurotransmitter (Drogen)
- Peptide (Beispiele)
- Proteine

**Dosis-Wirkung (Occupationsmodell)**

Allein die Dosis macht, dass etwas ein Gift ist (Paracelsus)



$$\frac{E}{E_m} = \frac{[D]^n}{[D]^n + K_d}$$

E: Effekt

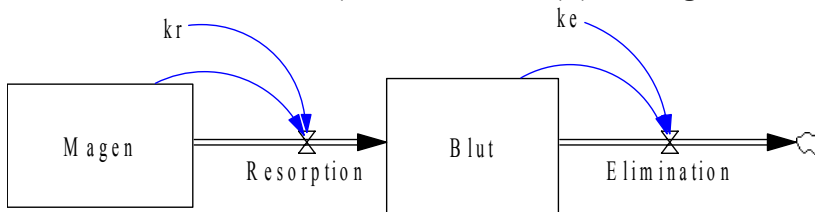
$E_m$ : maximaler Effekt  $\rightarrow E/E_m$ : relativer Effekt

[D]: Dosis

a: Empfindlichkeit

$k_d$ : Dissoziationskonstante (Wirksamkeit)

$$e_{rel} = \text{dosis}^{\text{empf}} / (\text{dosis}^{\text{empf}} + k_d)$$

**Zeitverlauf von Wirkstoffen (Bateman-Funktion) (Bioverfügbarkeit nicht berücksichtigt)**

$$c(t) = c(0) \cdot \frac{k_r}{k_r - k_e} \left( e^{-k_r t} - e^{-k_e t} \right)$$

$c(t)$ : Konzentration zur Zeit  $t$

$c(0)$ : Konzentration zur Zeit  $t=0$

$k_r$ : Geschwindigkeitskonstante der Resorption

$k_e$ : Geschwindigkeitskonstante der Elimination

$$c_{t\_mol} = c_{0\_mol} \cdot k_e / (k_e + k_a) \cdot (1 - e^{-(k_a \cdot t_{sec})}) \cdot (1 - e^{-(k_e \cdot t_{sec})})$$

**ct-Funktion (Habersche Regel) erweitert (Bioverfügbarkeit nicht berücksichtigt)**

$$D = t \cdot k \cdot \frac{(c - c_s) + \text{ABS}(c - c_s)}{2}$$

$t$ : Expositionszeit (s)

$k$ : Atemrate (m<sup>3</sup>/s)

$c$ : Konzentration (kg/m<sup>3</sup>)

$c_s$ : Schwellkonzentration (kg/m<sup>3</sup>)

ABS: Absolutbetrag (damit  $D=0$ , falls  $c < c_s$ )

$$\text{dosis\_mg} = \text{ar\_m3s} \cdot t\_s / \text{mg\_g} \cdot 1000 \cdot (\text{abs}(c\_molm3 - c_{s\_molm3}) + c\_molm3 - c_{s\_molm3}) / 2$$

$$\text{MIK} \approx \text{MAK} / 20$$

**Michaelis-Menten (Enzymwirkung)**

$$v = v_{\max} \cdot \frac{[S]}{[S] + K_m}$$

$v$ : aktuelle Geschwindigkeit

$v_{\max}$ : maximale Geschwindigkeit

[S]: Substratkonzentration

$K_m$ : Michaelis-Menten-Konstante (reziprok zur Gleichgewichtskonstanten)

$$v_c = v_{\max} \cdot c_s / (c_s + k_m)$$

**Variablen für Numeric-Solver**

(nur für Ti-89 oder Voyage 200, nicht für Ti-83,84)

Variablenname	Variable
af	Frequenzfaktor der Arrhenius-Gleichung
c_m3	Konzentration in mol/m <sup>3</sup>
c_mol	Konzentration in mol/l
ch3o	[H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> ] Konzentration in mol/l
clight	Lichtgeschwindigkeit (3•10 <sup>8</sup> m/s)
coh	[OH <sup>-</sup> ] Konzentration in mol/l
d_m	Distanz in Metern
c_a	Konzentration von A in mol/l (korr. Base)
c_ha	Konzentration von HA in mol/l (Säure)
c_ox	Konzentration des Oxidationsmittels (Nernst)
c_red	Konzentration des Reduktionsmittels (Nernst)
dc_m3	Δc, Konzentrationsdifferenz in mol/m <sup>3</sup> (Osmose)
dg0	ΔG°, Freie Reaktionsenthalpie in kJ
dh0	ΔH°, Reaktionsenthalpie in kJ
dtemp	ΔTemperatur in °C oder K
diffkonst	Diffusionskonstante (m <sup>2</sup> /s, 10 <sup>-9</sup> m <sup>2</sup> sec <sup>-1</sup> in Wasser)
dosis	Dosis in mg/kg
ds0	ΔS°, Reaktionsentropie in J/K
e_j	Energie in Joule
e_kwh	Energie in kWh
e0_v	Normalpotential E° in Volt (c= 1 mol/l)
ea_j	Aktivierungsenergie in J
ec_v	Nernstsches Potential bei Konz. c in Volt
edos	Effekt, der zur entsprechenden Dosis gehört
emax	maximaler Effekt (absolut)
empf	Empfindlichkeit in der Dosis-Wirkungskurve (stöch. Faktor)
erel	relativer Effekt (Maximum =1)
fkonst	Faradaysche Konstante in C pro mol
freq_hz	Frequenz in Hz
h_planck	Plancksche Konstante: 6.6*10 <sup>-34</sup> Js
hwz	Halbwertszeit (HWZ H3, HWZ C14...)
i_a	Strom in Ampère
kb	Basenkonstante
kd	Dissoziationskonstante = 1/kgg
kgg	Gleichgewichtskonstante
km	Michaelis-Menten-Konstante mol/l
konst	Konstante
krq	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante
ks	Säurekonstante
kw	Ionenprodukt des Wassers (bei 22°C, 10 <sup>-14</sup> )
m_kg	Masse in kg
mol_g	Molmasse in g
n_mol	Anzahl Mole, mol
nl	Avogadro-Konstante (6.022*10 <sup>23</sup> ) (Loschmidt-Konstante)
nt	Teilchen zur Zeit t
nt0	Teilchen zur Zeit t=0
p_pa	Druck in Pa
ph	pH-Wert
pkb	-log(Kb)
pks	-log(Ks)
pkw	-log(Kw)
q_c	Ladung in Coulomb, C
qelektron	Ladung von einem Elektron (-1,6021·10 <sup>-19</sup> C)
r_ohm	Widerstand in Ohm
rgas	Gaskonstante (8.31441)

t_sec	Zeit in Sekunden (t_m, t_h, t_d, t_y)
temp_c	Temperatur in Celsius
temp_k	Temperatur in K
u_v	Spannung in Volt
v_l	Volumen in Liter
v_m3	Volumen in m <sup>3</sup>
vmax	Maximale Geschwindigkeit (Enzymatik)
w_j	Arbeit, Energie in Joule
zlon	Ionenladung