

Week 43

Table of contents

Kommaer, punktumer, commas og dots.	1
Koncentrations enheder	2
Koncentration fra masse og volumen	2
Masse fra koncentration og volumen	2
Molekylærvægt	2
Fortynding	3
Ligevægts reaktions	3
Reaktions data analyse	3
Bufferligningen	4
Bufferligning visualisering	4

```
try:
    import fysisk_biokemi
    print("Already installed")
except ImportError:
    %pip install -q "fysisk_biokemi[colab] @ git+https://github.com/au-mbg/fysisk-biokemi.git"
```

```
import fysisk_biokemi.widgets as fsb_widgets
from fysisk_biokemi.widgets.utils import disable_custom_widget_colab,
enable_custom_widget_colab
```

Kommaer, punktumer, commas og dots.

På dansk skriver vi et decimaltal som "3,14", derfor også navnet et kommatal, men på engelsk bruges der punktum til at decimal separator så "3.14". Forskellige programmer udnytter kommaer på forskellige måder, f.eks:

- I Python bruges komma til at separere elementer, så 3,14 vil Python forstå som en tuple (som er en slags beholder) med to elementer 3 og 14.
- I en csv-fil bruges kommaer på en lignende facon til at separere indgange, så i en csv-fil med 3, 14 på en række vil give to søjler.

Prøv følgende i celle nedefor

- 3,14 + 6
- 3.14 + 6

```
# Prøv beregningerne her!
...
```

Vi vil bruge "." (punktum) som decimalseparator fremover.

Koncentrations enheder

Widgetten nedenfor kan konvertere mellem enheder med forskellige prefix, som værdien af er givet i tabellen

Enhed	Navn	Faktor
M		1
mM	Milli	10^{-3}
μ M	Micro	10^{-6}
nM	Nano	10^{-9}
pM	Pico	10^{-12}
fM	Femto	10^{-15}

```
fsb_widgets.concentration_unit()
```

Koncentration fra masse og volumen

Ofte er det nødvendigt at regne koncentrationen baseret på massen af stoffet og volumen af opløsningen, f.eks. hvis vi forbedrer et eksperiment vil vi tit starte fra den vinkel.

For at regne molar koncentrationen skal vi så regne

$$c = \frac{m}{M_W \cdot V} \xrightarrow{\text{Enheder}} \frac{\frac{\text{g}}{\text{mol}}}{\text{g} \cdot \text{L}} = \frac{\text{g} \cdot \text{mol}}{\text{g} \cdot \text{L}} = \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

Hvor m er massen i **gram**, M_W er molekyle vægten i $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$ og V er volumen i liter Her er det vigtigt at konvertere til de rigtige enheder, altså ikke f.eks. at bruge m i at mg. Widgetten nedenfor tager en masse, et volumen og en molekylærvægt og konvertere til molar koncentration, du kan vælge hvad enheden af masse og volumen er.

```
fsb_widgets.concentration_mass_volume()
```

Masse fra koncentration og volumen

Denne widget regne massen der skal til for at lave en opløsning med en given koncentration og volumen.

```
fsb_widgets.mass_concentration_volume()
```

Molekylærvægt

Molekylærvægten er en sum af atomarvægte

$$M_W = \sum_i^Z n_i m_Z$$

Hvor n_i er antallet af atomer af type i og m_Z er vægten pr. mol af det atom. Widgetten nedenfor kan regne molekylærvægten af stoffer med de første 83 elementer fra den periodiske table.

```
fsb_widgets.molecular_weight()
```

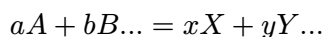
Fortynding

Denne widget kan regne hvordan en stock opløsning skal fortyndes for at opnå en ønsket koncentration.

```
fsb_widgets.dilution_helper()
```

Ligevægts reaktions

Denne widget kan regne ligevægtskonstanten af reaktioner, f.eks.



Hvor ligevægtskonstanten er givet ved

$$K_{eq} = \frac{[X]^x \times [Y]^y \times ...}{[A]^a \times [B]^b \times ...}$$

Her er det igen vigtigt at koncentrationerne er givet i *mol/L* for at der regnes rigtigt, men heldigvis kan widgetten konvertere dem for dig.

For at bruge widgetten skal du skrive en reaktions ligningen på formen

```
a A + b B = c C
```

Hvor der er mellemrum mellem ordren og stoffet, du kan så angive koncentrationen og ligevægtskonstanten bliver regnet.

```
fsb_widgets.reaction_equation()
```

Reaktions data analyse

Denne widget kan læse en .csv-fil hvilket er en comma separated values, det vil sige at forskellige data er splittet om i kolonner, se f.eks. eksemplet her

```
{csv}
time (s),A (mM),B (μM),X (nM),Y (μM)
0,1.00,500.0,100.0,50.0
10,0.95,480.0,150.0,70.0
20,0.92,460.0,200.0,90.0
30,0.90,445.0,240.0,110.0
40,0.88,430.0,270.0,130.0
50,0.87,420.0,300.0,150.0
60,0.86,410.0,330.0,170.0
70,0.85,400.0,360.0,190.0
80,0.84,390.0,390.0,210.0
90,0.83,380.0,420.0,230.0
100,0.82,370.0,450.0,250.0
```

Her er der 5 søjler, som beskriver 5 forskellige størrelser.

At bruge widgten kræver fire trin

- Klik på “Upload CSV” og vælg en fil.
- Sikre at reaktionsligning er den du er interesseret i.
- Sikre at hvert led af reaktionsligningen er tilknyttet den rigtige kolonne i datasættet og enheden er korrekt.
- Klik “Beregn og plot” for at beregne ligevægtskonstanten.

```
fsb_widgets.reaction_data_analysis()
```

Bufferligningen

Henderson-Hasselbalch ligningen (‘bufferligningen’) er givet ved

$$pH = pK_a + \log_{10} \left(\frac{[\text{base}]}{[\text{acid}]} \right)$$

Denne widget beregner forholdet mellem og koncentrationen af syre og base givet pH , pK_a samt total koncentrationen.

```
fsb_widgets.buffer_equation()
```

Bufferligning visualisering

Denne widget visualisere bufferligningen (Henderson–Hasselbalch). Du kan styre pK_a , total koncentration og området for pH . Plottet viser koncentrationen af syre og base som funktionen af pH .

```
enable_custom_widget_colab() # Gør ingenting udenfor Google Colab, men nødvendigt i Colab.  
fsb_widgets.buffer_visualization()
```

```
HBox(children=(VBox(children=(FloatSlider(value=7.0, description='pKa:', max=14.0,  
style=SliderStyle(descripti...
```