

Solvendiefektid keemias

LOKT.06.004 (6 EAP)

0. Sissejuhatus

07.02.2020

1

Aine sisu

- Üle 99% Keemiast toimub vedelfaasis
- See, millest räägime, on märksa laiem kasulikkusega, kui vaid lahustite keemia
- Sisuliselt on tegemist
 - füüsikalise orgaanilise keemia molekulidevahelisi vastasmõjusid käsitleva osaga
 - Vedelike omaduste keemiaga
- Saadavad teadmised on rakendatavad peaaegu kõigis keemia ja materjaliteaduse valdkondades

07.02.2020

2

Õppetöö

- Aine info
 - ÖIS-is
 - Põhilised materjalid: <http://tera.chem.ut.ee/~ivo/Solvent/>
 - Osad materjalid: <https://moodle.ut.ee/course/view.php?id=8474>
- Töövormid:
 - Loeng/Seminar
 - Praktikum
 - Kodutöö
 - 2 „korralist“ kodutööd + *ad hoc* kodutööd
- Aineprogrammis on võimalikud muudatused
 - Eksamiküsimused vastavalt läbitud materjalile
 - Mõni osa võib jääda iseseisvalt õppimiseks
 - Aineprogramm ei pruugi tingimata saada läbitud selles järjestuses

07.02.2020

3

Õppetöö

- Ivo Leito, Sofja Tšepelevitš
- Kaks aega:
 - E 12:15 – 13:45, ruumis 1022
 - R 10:15 – 11:45, ruumis 1100/1051
- Mõlemal ajal võib põhimõtteliselt olla loeng või praktikum
 - Alguses toimub mitu nädalat ainult loeng
 - Jooksva info selle kohta, millal järgmine kord on ja mida seal tehakse, saab loengus/praktikumis

07.02.2020

4

Infovahetus

- Aine info
 - ÖIS-is
 - <http://tera.chem.ut.ee/~ivo/Solvent/>
- ÖIS-i kaudu e-mail
 - Hoolitsege selle eest, et Teil oleks ÖIS-is kirjas toimiv e-maili aadress
- Kui õppejõud loengus/praktikumis mingit korralduslikku infot annab, siis ta eeldab, et kõik on seda kuulnud
 - Kes kohal polnud, peab ise hoolitsema selle eest, et saaks teiste käest teada

07.02.2020

5

Praktikum

- Arvutipraktikum
- Lahustiefektide modelleerimine praktiliste probleemide lahendamiseks
- Näited:
 - Milline aine A kahest vormist on antud keskkonnas stabiilsem? Millised on nende vormide suhtelised sisaldused? Kas/kuidas need suhted muutuvad keskkonna muutudes?
 - Milline on aine A jaotuskoeffitsient kahe erineva faasi vahel?
 - Milline on aine A lahustuvus antud segus?
 - Leidke lahusti, mis lahustab kõige paremini ainet A
 - Leidke lahusti, mis ainet A kõige paremini veest välja ekstraheerib

07.02.2020

6

Praktikum

- Vajalik on **COSMOtherm** tarkvara
- Eelistatult paigaldame selle tarkvara Teie enda sülearvutile
 - Kellel pole sülearvutit, vaatame eraldi
- Tarkvara installeerimisel aitab Sofja Tšepelevitš
 - sofia.ts@gmail.com

07.02.2020

7

Materjalid

- Põhilised materjalid veebis

Pidage silmas, et loengus annab õppejõud märksa rohkem infot, kui on loenguslaididel

Eksamil eeldatakse vastuseid mitte ainult slaidide vaid ka õppejõu jutu baasil!

07.02.2020

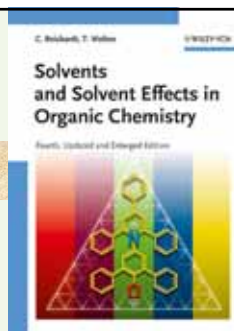
8

Kirjandus

- Üks põhilisi õpikuid:

C. Reichardt, T. Welton *Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry*, 4th ed. VCH, Weinheim, 2011

- Saadaval PDF failina TÜ võrgus
 - Link Moodle



07.02.2020

9

Kirjandus

- Lahustite andmed, omaduste skaalad:

J.L.M. Abboud, R. Notario *Pure Appl. Chem.* 1999, 71, 645-718
(Tasuta saadaval www.iupac.org ja Moodle)



07.02.2020

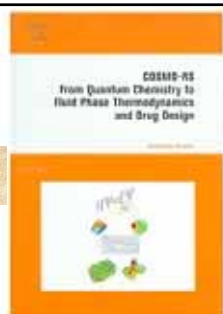
10

Kirjandus

- COSMO-RS meetodi kohta:

A. Klamt *COSMO-RS: From Quantum Chemistry to Fluid Phase Thermodynamics and Drug Design*; Elsevier : Amsterdam, 2005

- Sügavamale huvilisele
- Saadaval Keemia raamatukogus



07.02.2020

11

Teadmiste kontroll

- Loeng lõpeb eksamiga kogu materjali peale
 - Korralised kodutööd peavad tehtud olema
- Eksam on suuline
- Osad/kaalud:
 - **70%**: teoreetilised küsimused, mis on ette teada
 - Need täpsustatakse semestri lõpul vastavalt semestri jooksul reaalselt läbitud (või iseseisvaks õppimiseks jäetud) teemadele
 - Materjale kasutada ega suhelda ei tohi
 - **30%**: probleemküsimused/ülesanded
 - Arvutil, COSMO-RS tarkvara abil
 - Samased neile, mida me teeme praktikumis
 - Materjale võib kasutada
- Omavahel (ja teiste inimestega) suhelda ei tohi

07.02.2020

12