

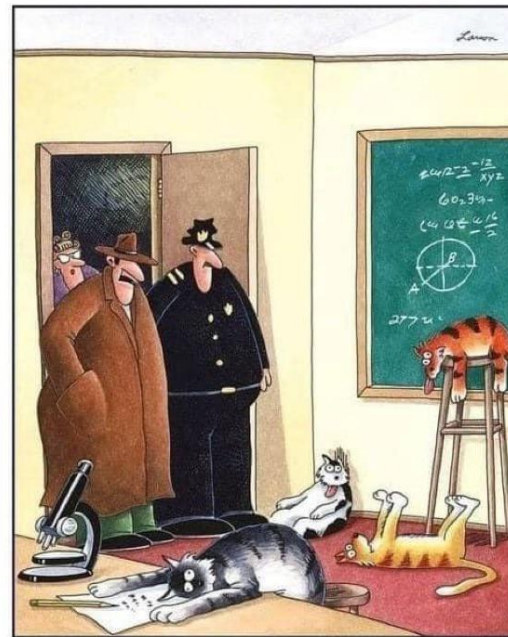
Olemine ja kirjeldamine

Toomas Kaevand

Viitna, august 2025

Soov asjade olemust seletada

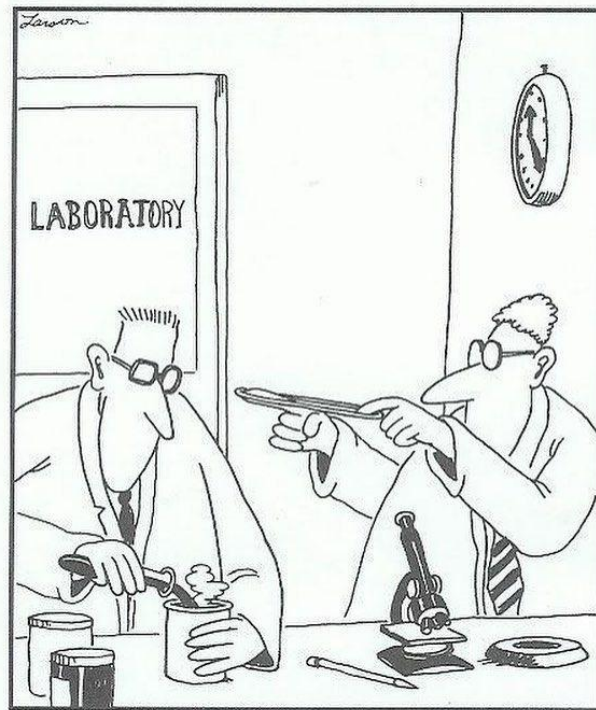
- Inimestele on omane fundamentaalne soov seletada asju ja nähtusi



"Notice all the computations, theoretical scribbles, and lab equipment, Norm. ... Yes, curiosity killed these cats."

Mida on vaja keemia vaates kirjeldada

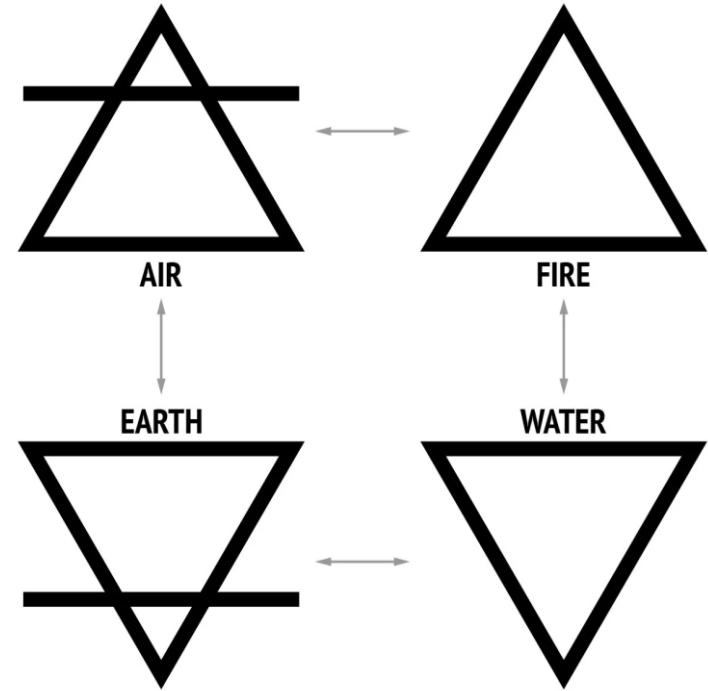
- Aineid
 - Keemilisi elemente
 - Elementidest moodustatud süsteeme – molekule
- Keemilisi protsesse
 - Reaktsioone



On Oct. 23, 1927, three days after its invention, the first rubber band is tested.

Kuidas on kirjeldatud

- Ajalooliselt püsis idee neljast elemendist ja jagamatust aatomist
 - Maa
 - Vesi
 - Õhk
 - Tuli



Keemiliste elementide avastamine

Tänapäevaste keemiliste elementide defineerimine ja avastamine

- Boyle keemiliste elementide defineerimine kui lihtsaimad ained (substantsid), mida ei ole enam võimalik lagundada
- Lavoisier – massi jäävuse seadus. Lisaks elemendid O_2 , N_2 , S, P, C jne
- Dalton – aatomiteooria ja formaliseeritud atomism: materia koosneb fikseeritud massiga aatomitest

Aatom, elektron ja tuum

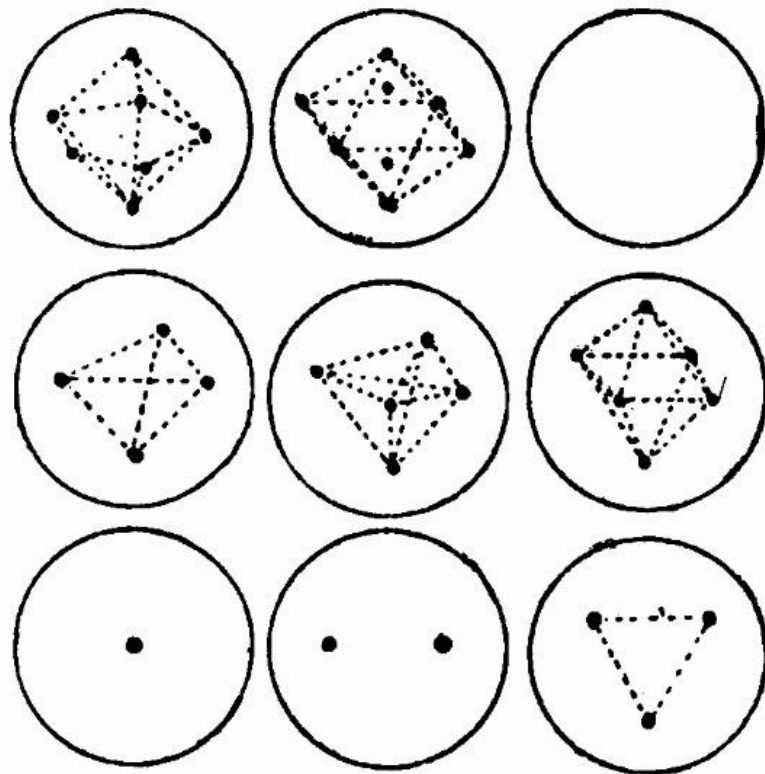
- Aatom – jagamtu

Ja siiski jagatav, veelgi hullem, ka tuum on jagatav:

- J. J. Thomson – aatomist väiksemate negatiivse laenguga osakeste avastamine
- E. Rutherford
 - Aatomi tuum – raskete positiivse laenguga osakesed aatomite südamikus, millesse on koondunud peamine mass
 - Prooton – vesiniku aatomi tuum
- J. Chadwick – neutron, seletus sellele, kuidas aatomi tuumad võivad olla raskemad, kui kui lihtsalt prootonite arv

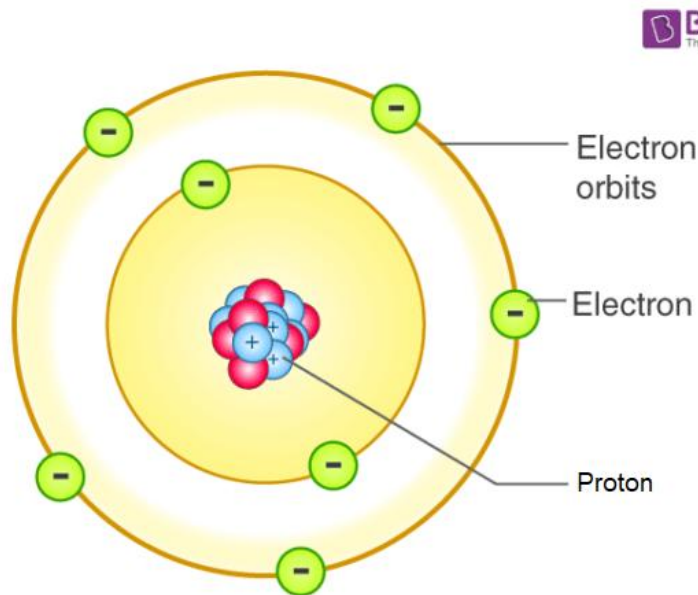
Rosinapudingi või ploompudingi mudel

J. J. Thomsoni 1905. aasta
illustratsioon tema
hüpoteetilisele elektronide
paigutusele aatomis.



Planetaarmudel

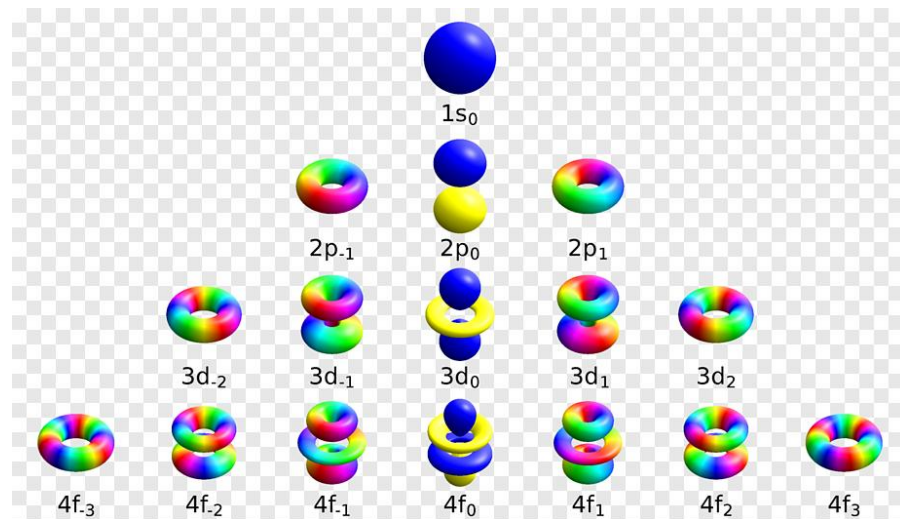
1913 kirjeldas Niels Bohr aatomi tuum analoogselt miniatuursele planetaarsüsteemil, kus elektronid tiirlevad ümber aatomi tuuma nagu planeedid ümber tähe.

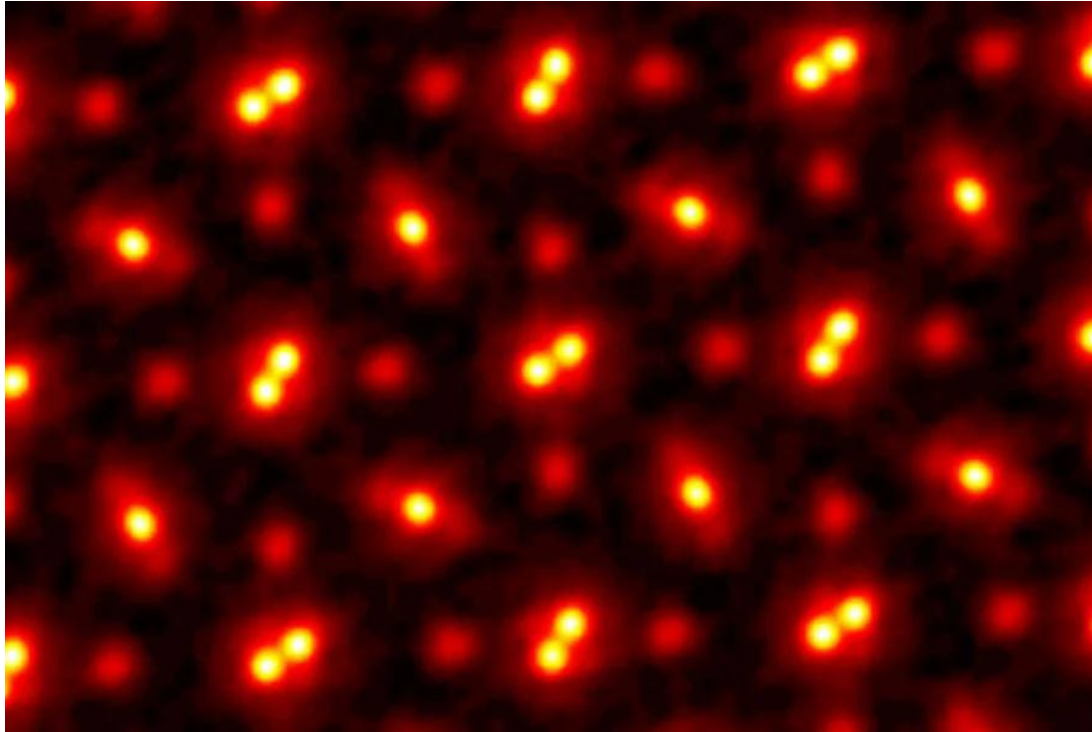


Bohr atomic model of a Nitrogen atom

Orbitaalid

- Elektronid ei tiirle aatomi tuuma ümber orbiitidel
- Elektronid asustavad kindlatele energiatele vastavaid piirkondi aatomi tuuma ümber – orbitaale



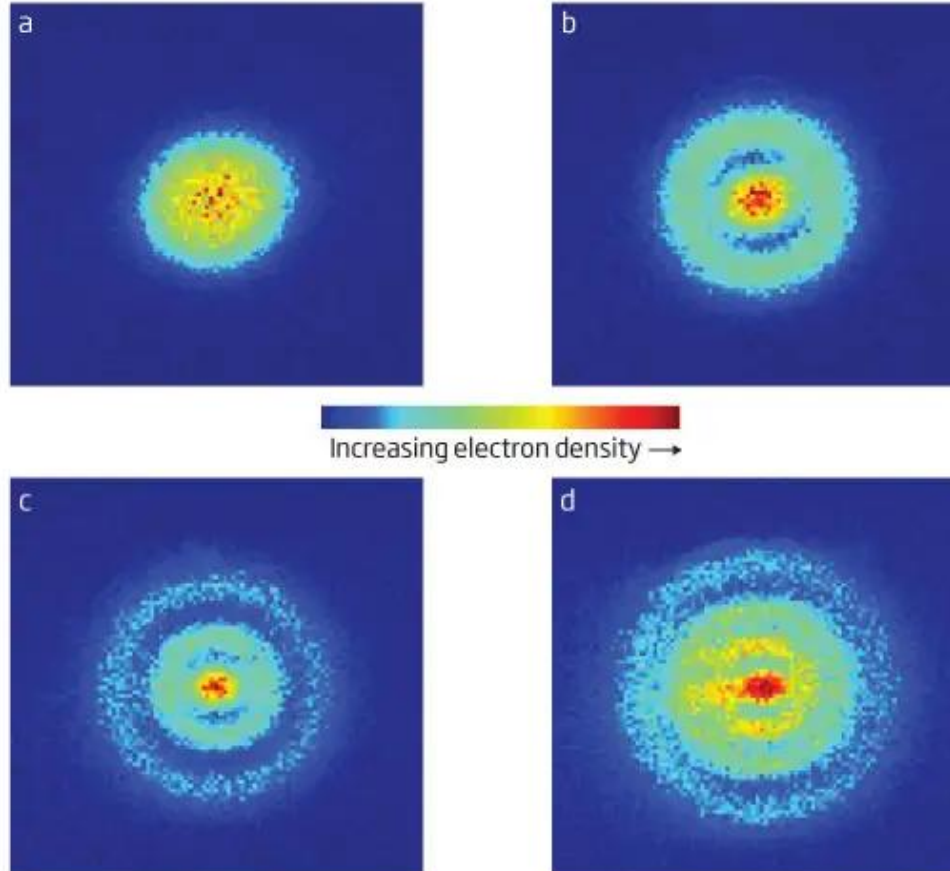


- Praseodüüm
ortoskandaadi (PrScO_3)
kristalli
elektronptüograafiline
rekonstruktsioon.
Suurendus 100 miljonit
korda

An atom undressed

©NewScientist

Electrons have quantum properties so can be in many places at once, making it hard to image atoms. By combining snapshots of many electrons at once, hydrogen atoms have now been imaged at four energy levels (increasing from a to d)



Struktuuriteooria

- Selgitab molekulide omadusi ja käitumist, keskendudes aatomite paigutusele ja nende vahelistele ühendustele
- Mis viis struktuuriteooriani:
 - Isomeeria avastamine
 - Kekulé, Couper, Butlerov – tulid välja ideega, et aatomil võib olla ainult kindel arv sidemeid

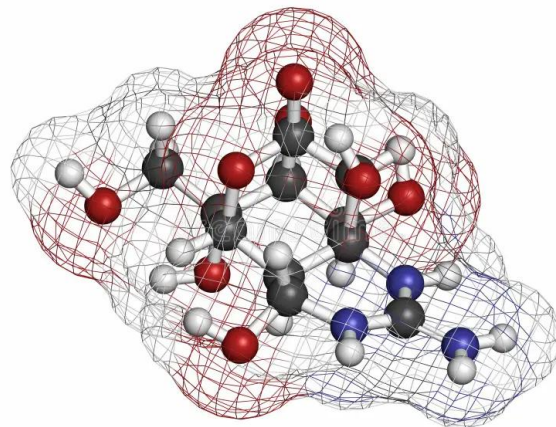
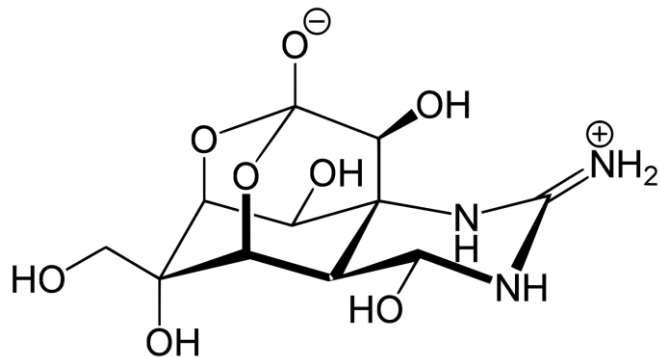
Kuidas keemilisi struktuure kirjeldatakse

- Molekulvalem – molekuli koostis empiiriliselt
- Struktuurivalem – molekulide ja nende vaheliste seoste kaart
 - Võib olla nii 2D kui 3D esituses
- Lewis struktuurid – elektronide jagamise skeem

Molekulvalem ja struktuurivalem

Tetrodotoksiin

Molekulvalem: $C_{11}H_{17}N_3O_8$, struktuurivalemid 2D ja 3D esituses



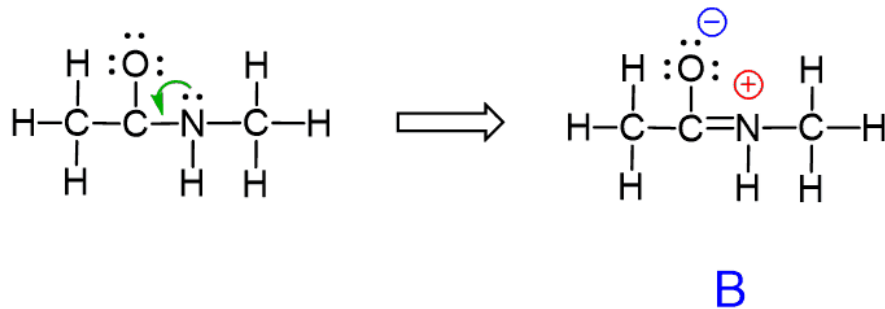
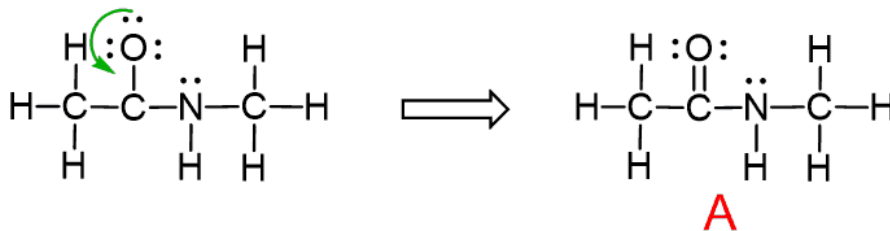
Fugu ehk kerakala

Fugu kala ja sashimi vormis



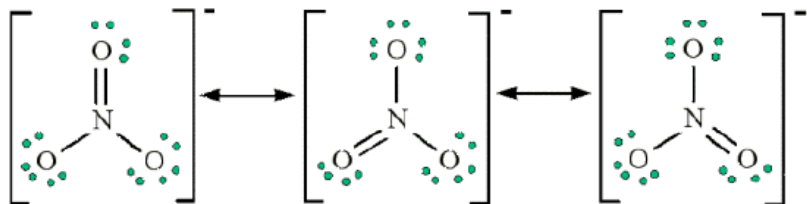
Lewis struktuurid

Näitavad lisaks struktuurile ka vabu elektronpaare

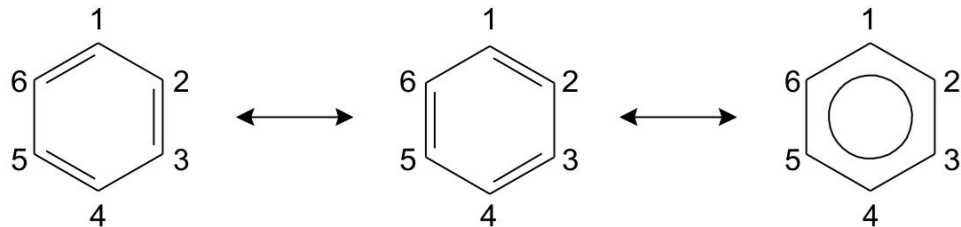


Resonantsstruktuur

- Kirjeldab aatomite vahelisi delokaliseeritud elektronidega sidemeid ehk komplekti Lewise struktuure, mis väljendavad sama aine erinevaid võimalike seisuneid.



Nitraatiooni NO_3^- resonantsstruktuur

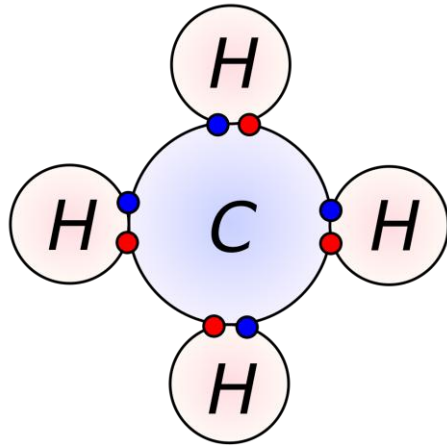
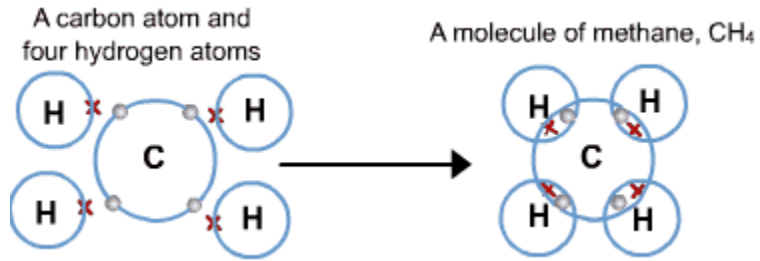


Benseeni resonantsstruktuur

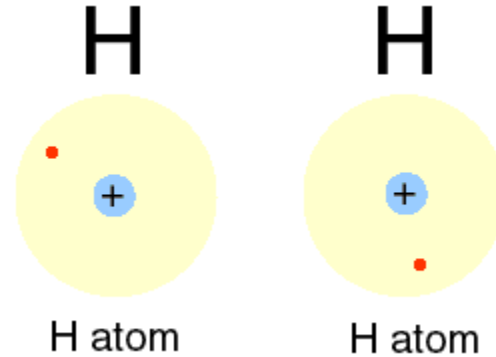
Keemiline side

- Jõud, mis hoiab aatomid omavahel koos
- Keemilised sidemed jagunevad üldistatult neljaks:
 - Kovalentsed sidemed
 - Ioonilised sidemed
 - Metallilised sidemed
 - Molekulide vahleised “sidemed”

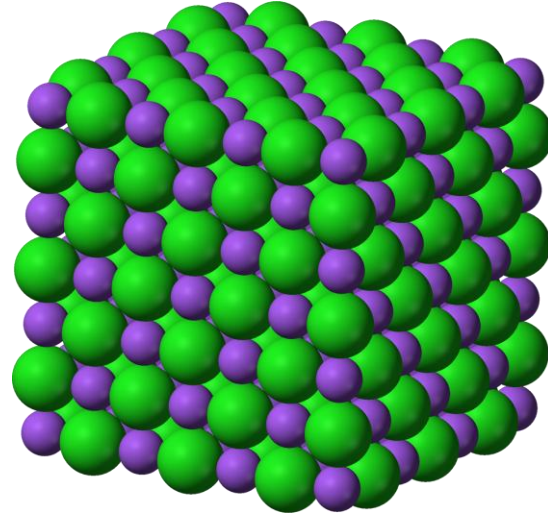
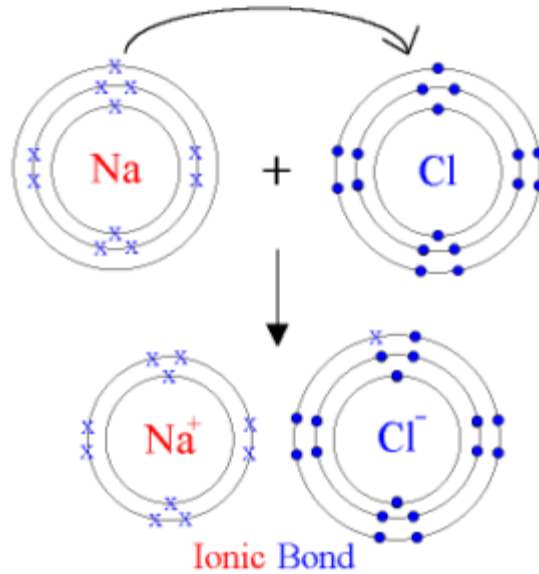
Kovalent bonding



- Electron from hydrogen
- Electron from carbon



Ionized sodium chloride

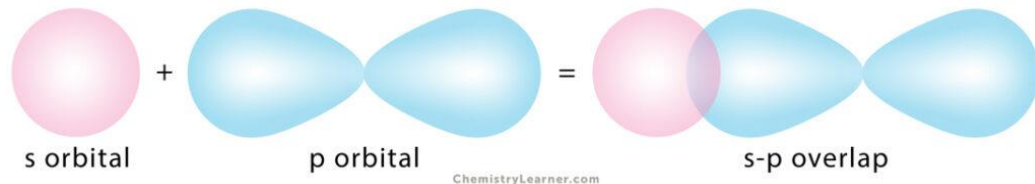
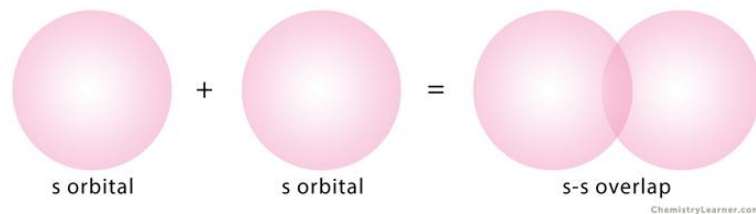
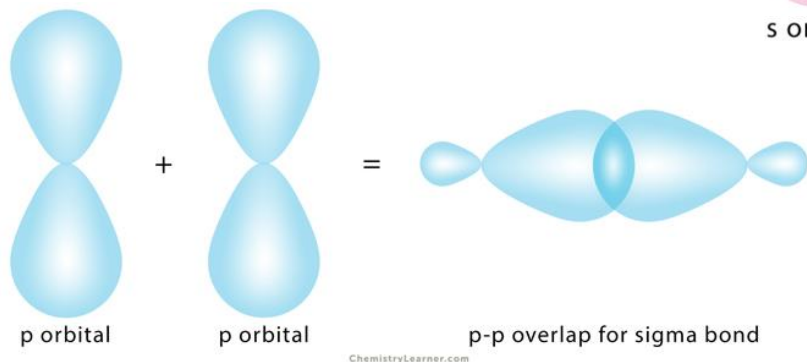


Kirjeldus ja tegelikus

- Keemilisi sidemeid üldistatakse tavaliselt aatomeid koos hoidvaks “latiks”
- Tegelikuses on toimub aatomite vahel elektronide jagamine – orbitaalide ülekattumiste kaudu

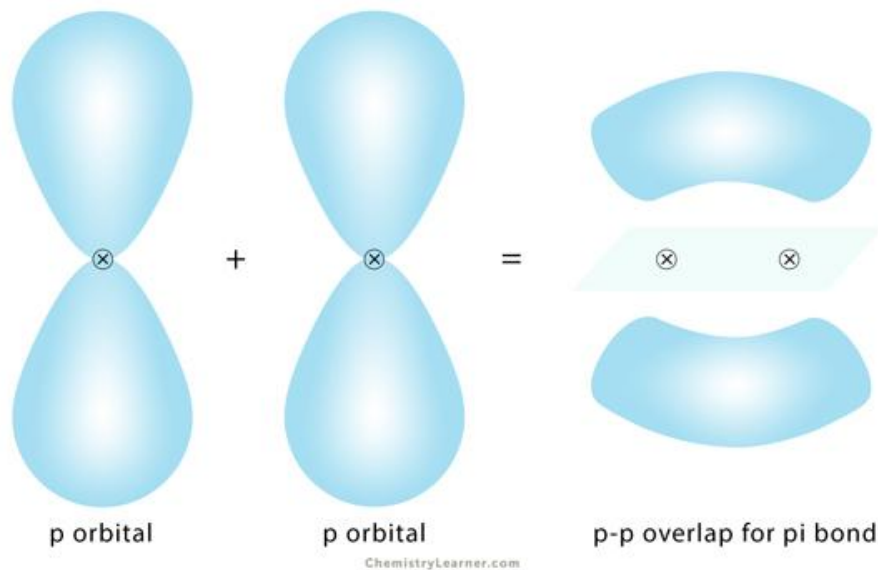
Sigma sidemed (σ -side)

- Esinevad üksiksidemete tüübid

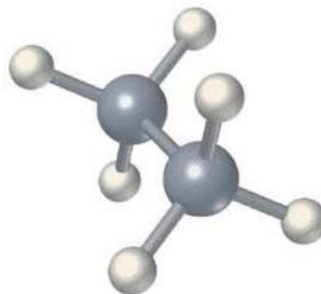
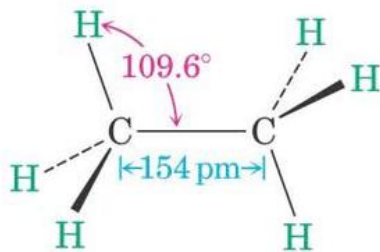
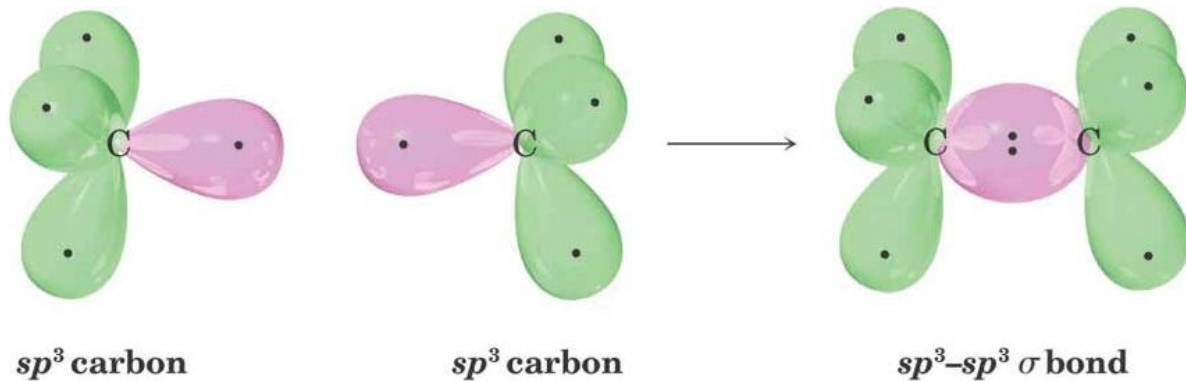


Pi-side (π -side)

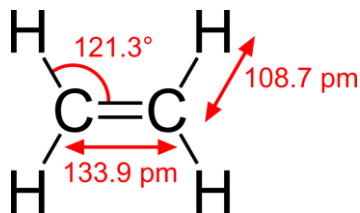
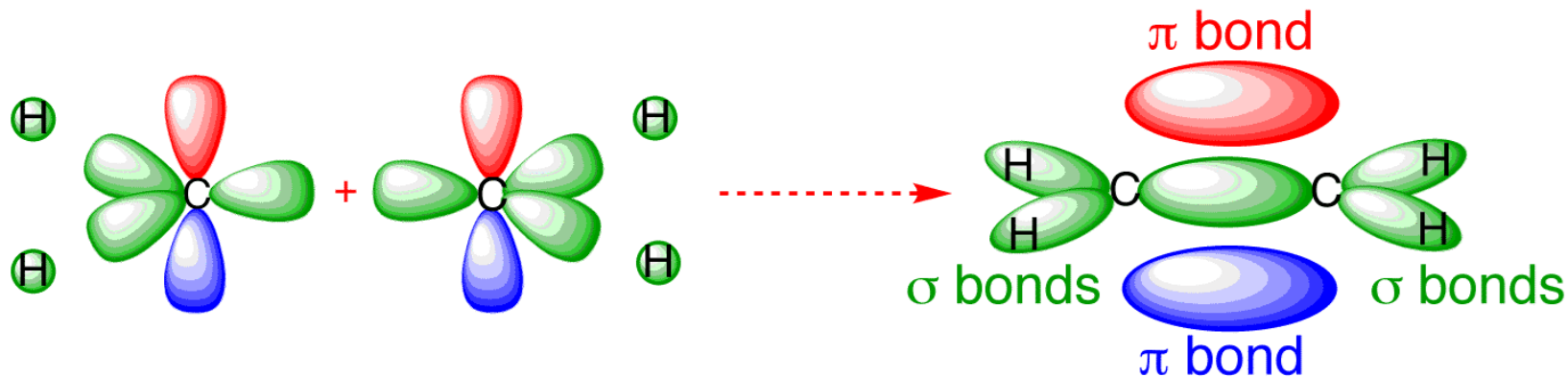
- π -side p orbitaalide kahe laba ülekattumine
- π - ja σ -sidemed on koos kaksik- ja kolmiksidemetes



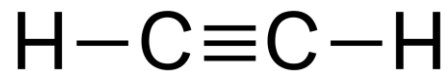
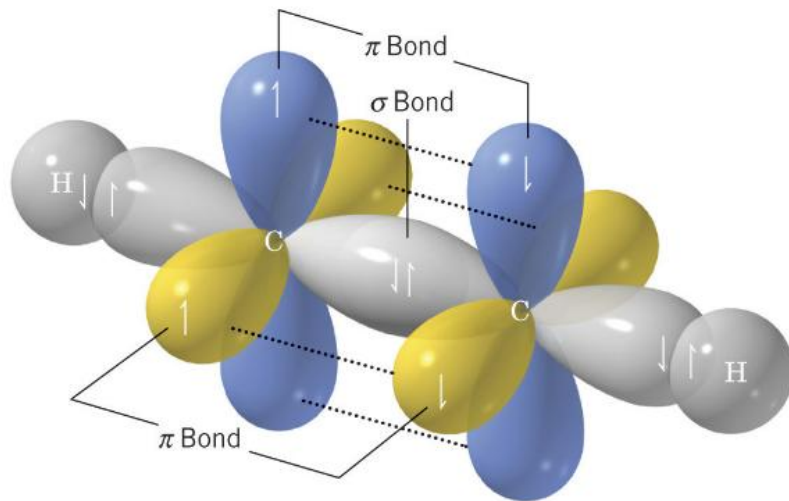
Näide: etaan – kõik on σ -sidemed



Näide: eteen – üks σ - ja üks π -side



Näide: etüün – üks σ - ja kaks π -sidet



Arvutuskeemia

- Arvutuskeemia kasutab arvutisimulatsioone keemiliste süsteemide uurimiseks, et ennustada molekulide käitumist, omadusi ja reaktsioone.
- Aitab keemilistest süsteemidest paremini aru saada ilma füüsilisi eksperimente läbi viimata
- Peamiselt kasutusel reaktsioonimehhanismide selgitamiseks, ravimidisainis, materjaliteaduses ja katalüüsi uurimisel.



Kirjeldamise tasemed

- Kvantmehaanika
- Molekulaarmehhaanika ja -dünaamika
- Jämedad-teraline modelleerimine (Coarse-grained modeling)
- Monte Carlo meetodid

Kvantkeemia

- Kirjeldab molekule alustades kvantmehaanikast.
- Tavaliselt lahendades (tegelikult lähendades)
Schrödingeri võrrandit elektronide jaoks
- Kasutatav arvutustes mõnekümnest mõnesaja aatomini
- Kasutus:
 - Molekuli kuju (täpsem leidmine)
 - Keemiliste sidemete energiad
 - Reaktsioonimehhanismid
 - Spektroskoopia jne

Molekulaarmehhaanika

- Aatomite modelleerimine kerade ja keemiliste sidemete modelleerimine vedrudena
- Arvutustes on Newtoni mehaanika
- Jõuväljad molekuli ehituses olevate aatomite vaheliste seoste kirjeldamiseks
- Võib arvutada miljonite aatomite ulatuses
- Kasutus:
 - Makromolekulide modelleerimine
 - Suure mahulised konformatsiooniotsingud jne

Molekulaardünaamika

- Aatomite liikumise simuleerimine.
- Newtoni mehaanika
- Jõuväljad
- Saab modelleerida süsteem, mis koosnevad miljonitest aatomitest
- Kasutus:
 - Polümeermaterjalide omadused
 - Valkude ja biomolekulide omadused
 - Diffusioon
 - Termiline stabiilsus

Jämeda-teraline modelleerimine

- Suurte süsteemide (miljardid aatomid või molekulid) modelleerimine
- Aatomid grupeeritakse “kerakesteks”, mis esindavad mitmeid molekule või suurte molekulide osi (nt funktsionaalseid gruppe)
 - Näiteks 3-4 vee molekuli ühes kerakeses
- Võimaldab modelleerida suhteliselt pikki ajavahemike (mikrosekundite või millisekundite skaalas)
- Kasutus:
 - Süsteemide iseorganiseerumine
 - Materjaliteadus (nano-osakesed, geelid)

Nüüd on piisavalt kirjeldatud, kas oleme olemusele lähemal?

