

4. Synteesin materiaalitehokkuus ja ympäristökuormitus

4.A Taulukko: Kemiallisen synteesin materiaalitehokkuuden ja ympäristökuormituksen mittaamiseen käytettäviä suureita

4.B Teksti: Butyyliasetaatin synteesi

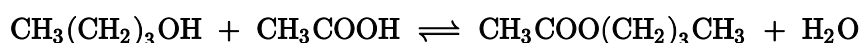
4.A Taulukko: Kemiallisen synteesin materiaalitehokkuuden ja ympäristökuormituksen mittaamiseen käytettäviä suureita

Suure	Laskukaava
Atomieconomia (AE, %) kuvaava sitä, kuinka suuri osa lähtöaineiden atomeista stoikiometrian mukaan päätyy lopputuotteeseen.	$AE, \% = \frac{\nu(\text{tuote}) \cdot M(\text{tuote})}{\sum \nu_i \cdot M_i} \cdot 100 \%, \text{ jossa}$ $\nu(\text{tuote}) = \text{lopputuotteen stoikiometrinen kerroin reaktioyhtälössä}$ $M(\text{tuote}) = \text{lopputuotteen moolimassa}$ $\nu_i = \text{lähtöaineen } i \text{ stoikiometrinen kerroin reaktioyhtälössä}$ $M_i = \text{lähtöaineen } i \text{ moolimassa}$ $i = 1, 2, 3 \dots n, \text{ eli } \sum \nu_i \cdot M_i \text{ tarkoittaa sitä, että lasketaan tulo } \nu \cdot M \text{ kaikille reaktioyhtälön lähtöaineille ja lasketaan nämä tulot lopuksi yhteen.}$ $\text{Esimerkiksi reaktiolle } 2 A + B + 3 C \rightarrow 4 D$ $\sum \nu_i \cdot M_i = 2 \cdot M(A) + M(B) + 3 \cdot M(C) \text{ ja}$ $\nu(\text{tuote}) \cdot M(\text{tuote}) = 4 \cdot M(D)$
Ympäristötekijä (E-tekijä) ottaa huomioon koko materiaalitehokkuuden. Jätteisiin lasketaan mukaan muun muassa reagoimattomat lähtöaineet, mahdolliset apuaineet, pesuliuokset ja muut liuotinjätteet, jos niitä ei kierrätetä.	$E\text{-tekijä} = \frac{\text{synteesissä muodostuvien jätteiden ja sivutuotteiden massojen summa}}{\text{puhdistetun lopputuotteen massa}}$

Lähde: YTL.

4.B Teksti: Butyyliasetaatin synteesi

Kun 37,0 g butan-1-olia ja 60,0 g etikkahappoa (etaanihappoa) sekä pieni määrä katalyyttinä toimivaa rikkihappoa sekoitettiin keskenään, tapahtui reaktio



Tasapainon asetuttua reaktioseos kaadettiin astiaan, jossa oli 250 g vettä. Seoksesta erotettiin muodostunut butyyliasetaatti (butyylietanaatti), joka puhdistettiin pesemällä vedellä, kylläisellä natriumvetykarbonaattiliuoksella ja vielä uudelleen vedellä. Pesuvaiheessa vettä kului yhteensä 125 g ja natriumvetykarbonaattiliuosta 25,0 g.

Lopuksi butyyliasetaatti kuivattiin käyttäen 5,0 g vedetöntä natriumsulfaattia. Natriumsulfaatti suodatettiin pois ja butyyliasetaatti punnittiin. Punnitustulos oli 40,0 g. Synteesin olosuhteissa ei ollut mahdollista kierrättää mitään käytetyistä aineista. Käytetyn rikkihapon määrä oli niin pieni, että sitä ei tarvitse huomioida laskettaessa synteesille taulukon 4.A suureita.

5. Fysiologinen suolaliuos

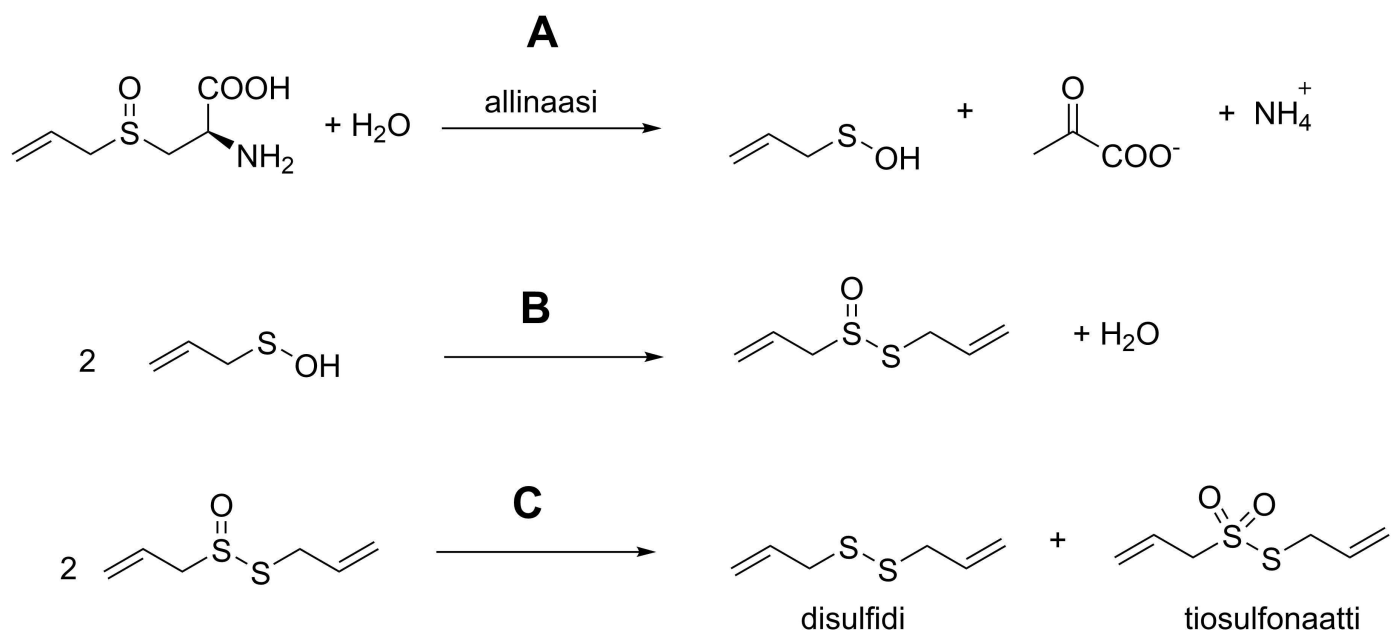
5.A Taulukko: Natriumkloridiliuosten sähkönjohtavuudet

$c(\text{NaCl})$ (mol/l)	Sähkönjohtavuus (mS/cm)
0,220	22,3
0,180	18,2
0,140	14,1
0,100	10,0

Lähde: YTL.

6. Hajuaistin hyödyntäminen titrauksessa

6.A Kuva: Titrauksen ekvivalenttipisteessä tapahtuvat reaktiot

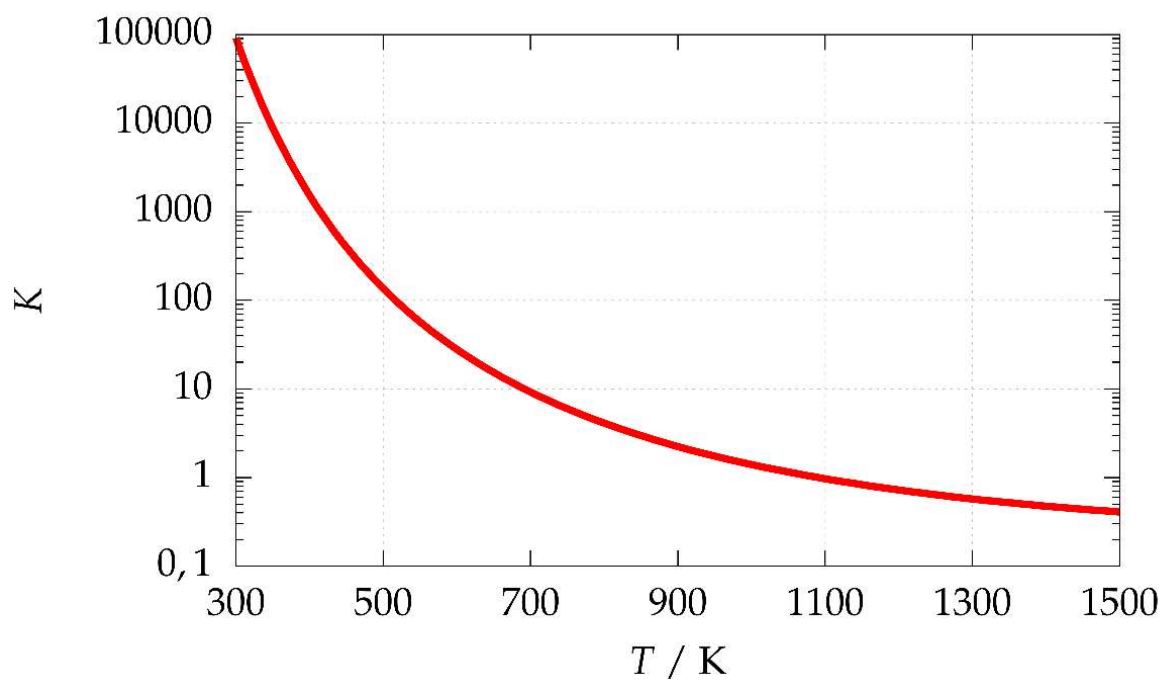


Lähde: Neppel, K.; Oliver-Hoyo, M. T.; Queen, C.; Reed, N. *A Closer Look at Acid-Base Olfactory Titrations*, s. 82, s. 607–610. J. Chem. Educ. Julkaistu: 2005.
Muokkaus: YTL.

Lähde: Flair, M. N.; Setzer, W. N. *An Olfactory Indicator for Acid-Base Titrations – A Laboratory Technique for the Visually Impaired*, s. 67, s. 795–796. J. Chem. Educ. Julkaistu: 1990. Muokkaus: YTL.

8. Vesikaasun siirtoreaktio

8.A Kuva ja taulukko: Vesikaasun siirtoreaktion tasapainovakion K arvo eri lämpötiloissa T



Lähde: Callaghan, Caitlin A. *Kinetics and catalysis of the water-gas-shift reaction: A Microkinetic and Graph Theoretic Approach*. Worcester Polytechnic Institute. Väitöskirja. Julkaistu: 2006. Muokkaus: YTL.

9. Beetasalpaajan kemiaa

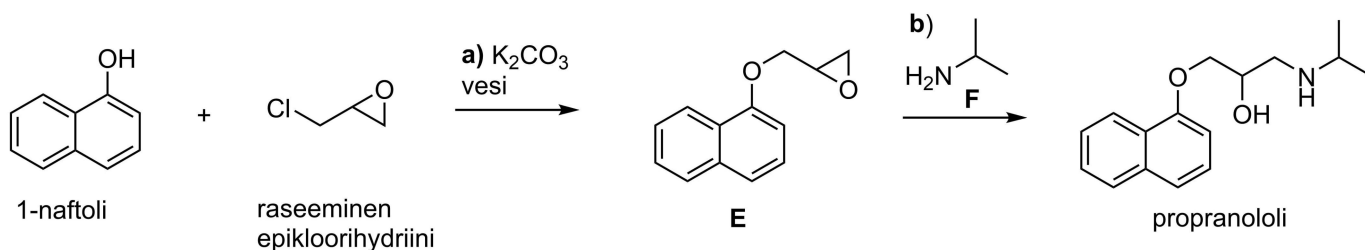
9.A [Kuva: Propranololin synteesireitit](#)

9.B [Teksti ja kuva: log D](#)

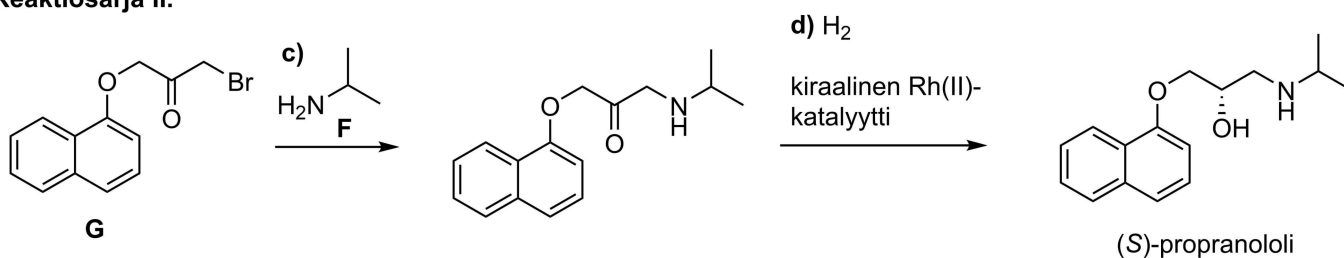
9.C [Tiedosto: Propranololin rakenne MarvinSketch-tiedostona](#)

9.A Kuva: Propranololin synteesireitit

Reaktiosarja I.



Reaktiosarja II.



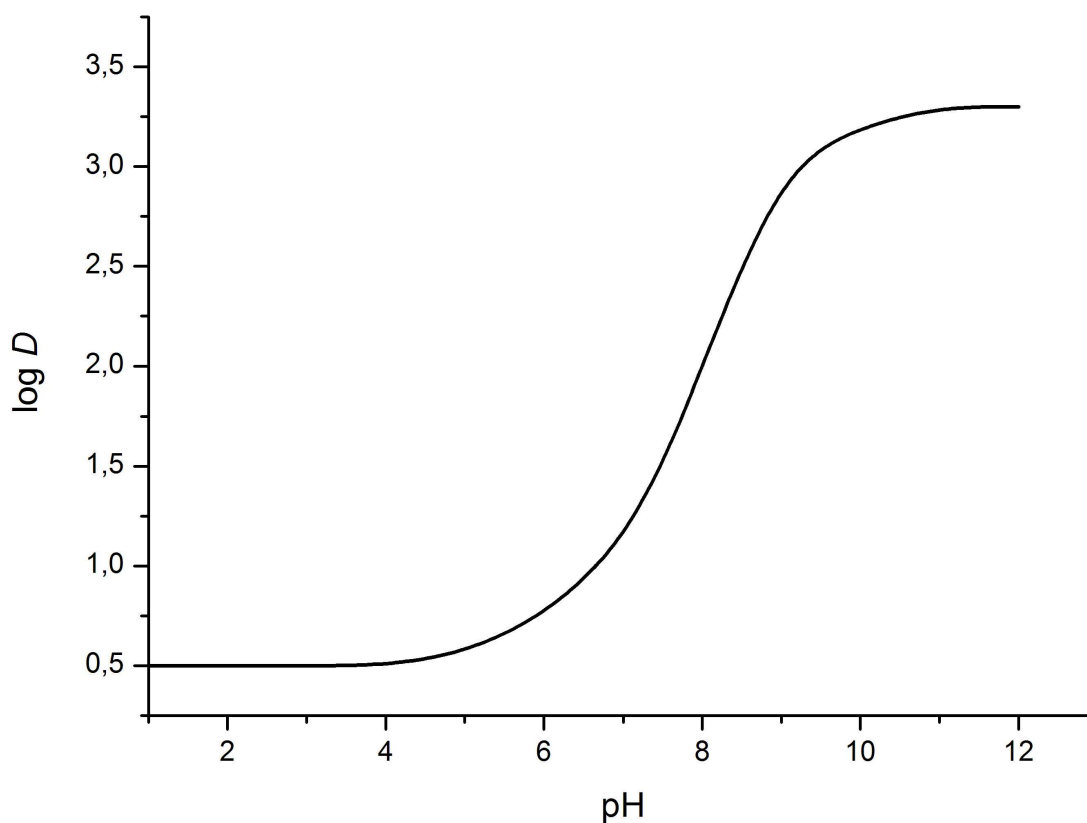
9.B Teksti ja kuva: $\log D$

Yksi yhdisteen rasvaliukoisuuden mittari on $\log D$. Kun halutaan selvittää, liukeneeko tutkittava yhdiste paremmin veteen vai lipidifaasiin, yhdistettä liuotetaan veden ja poolittoman liuottimen seokseen. Kun $\log D$ määritetään, poolittomana liuottimena käytetään oktan-1-olia, joka on käytännössä veteen liukenematon. Suure D määritellään yhdisteen jakaantumisena oktan-1-olin ja veden välille:

$$D = \frac{[\text{yhdiste}]_{\text{oktan-1-oli}}}{[\text{yhdiste}]_{\text{vesi}}}$$

Jos yhdiste voi luovuttaa tai vastaanottaa H^+ -ionin, vesifaasina pitää käyttää puskuriliuosta, jonka pH-arvo tunnetaan. Tällöin yhdisteen konsentraatioon kummassakin faasissa lasketaan mukaan yhdisteen happo- ja emäsmuotojen (HA ja A^-) yhteiskonsentraatio kyseisessä pH-arvossa.

Historiallisista syistä käyttöön on vakiintunut muoto, jossa logaritmin kantalukua 10 ei ole merkitty, eli $\log D = \log_{10} D$. Alla on kuvattu propranololin $\log D$ pH:n funktiona.



9.C Tiedosto: Propranololin rakenne MarvinSketch-tiedostona

[T9C.mrv](#) (MarvinSketch)

11. Proteiinit ja peptidit

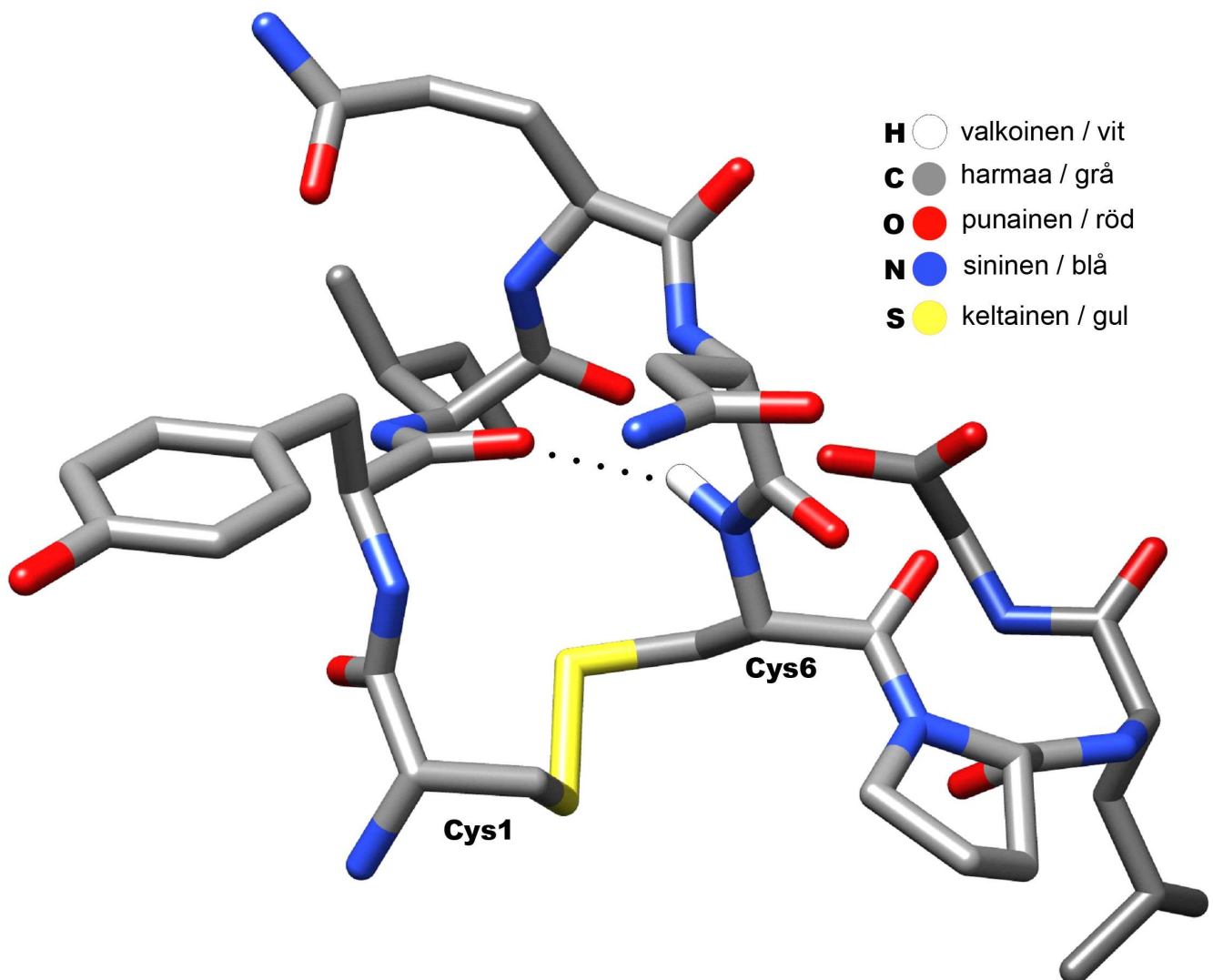
11.A Kuva ja video: Oksitosiinin rakenne

11.B Kuva: Insuliinin rakenne

11.C Kuva ja video: Kollageenin rakenne

11.A Kuva ja video: Oksitosiinin rakenne

Huomaa, että kuvassa molekyylin vetyatomit eivät ole näkyvissä Cys6:n N-H-vetyatomia lukuun ottamatta.

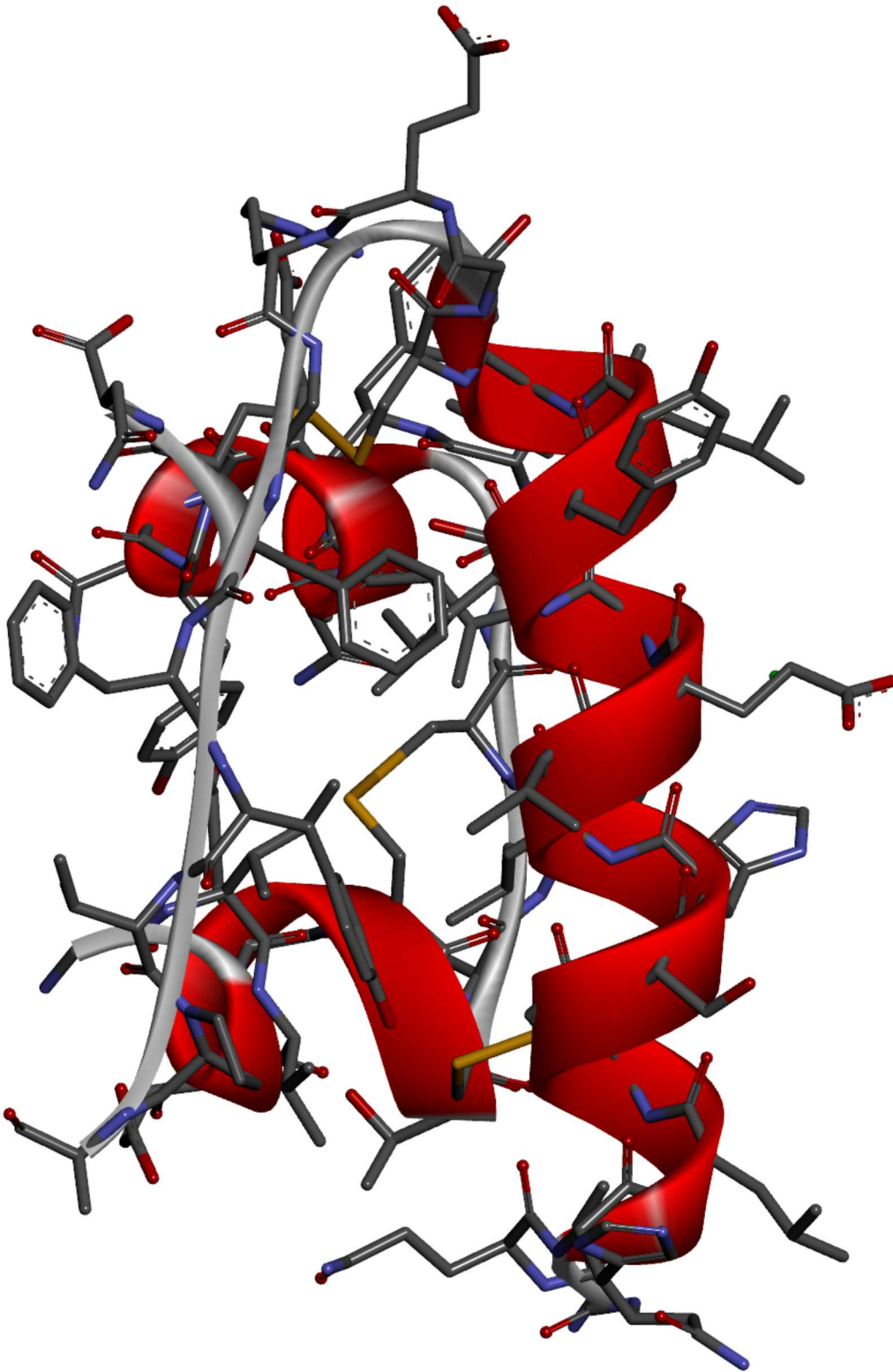


Huom.! Videossa ei ole ääntä.

0:00 / 0:16

Lähde: YTL.

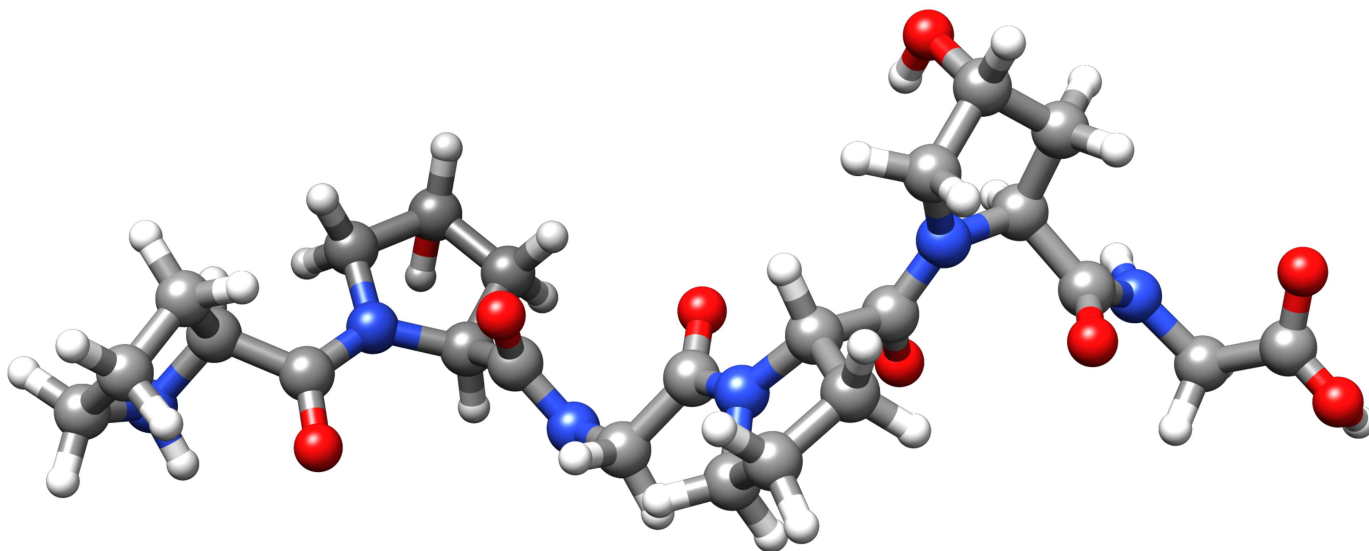
11.B Kuva: Insuliinin rakenne



Lähde: Smith, G.D., Pangborn, W.A., Blessing, R.H. *Phase changes in T(3)R(3)f human insulin: temperature or pressure induced?*. Acta Crystallogr D Biol Crystallogr 2001, 57, 1091-1100, ID: 1G7A. Protein Data Bank. <https://www.rcsb.org/structure/1G7A>. Viitattu: 1.7.2021. Muokkaus: YTL.

11.C Kuva ja video: Kollageenin rakenne

Atomien värit ovat samat kuin aineistossa 11.A.



Huom.! Videossa ei ole ääntä.

0:00 / 0:21

Lähde: YTL.