



2004-2006 m. Bendrojo programavimo dokumento 2 prioriteto „Žmogiškųjų išteklių plėtra“ 4 priemonė „Mokymosi visą gyvenimą sąlygų plėtra“

Projekto sutarties numeris: ESF/2004/2.4.0-K01-160/SUT-261

Projekto pavadinimas: **Inovatyvūs mokymosi metodai ir naujausios technologijos gamtos mokslų bakalauro rengimui**

BIO 323. BIOFIZIKA

Laboratorinis darbas

SĄVEIKOS DIPOLIS-DIPOLIS TYRIMAS

DARBO TIKSLAS:

Susipažinti su tarpmolekuline sąveika dipolis-dipolis.

DARBO UŽDUOTYS:

1. Naudojant ChemWiz ir grafinės analizės įrangą, ištirti sąveiką dipolis-dipolis tarp dviejų HCl molekulių;
2. Nustatyti atstumą tarp dviejų HCl molekulių, nulemtą sąveikos dipolis-dipolis.

TEORIJA:

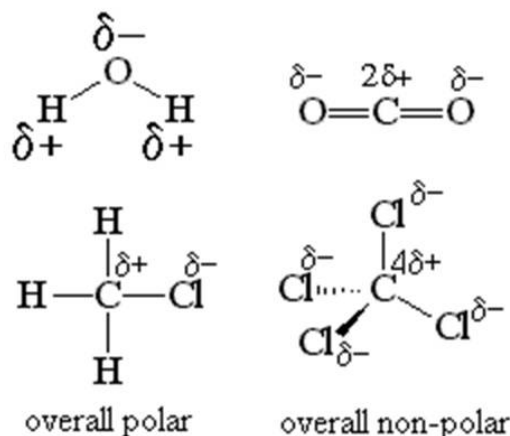
Molekulės dipoliai. Sąveika dipolis-dipolis

Dviejų priešingo ženklo, bet vienodo didumo taškinių krūvių q , esančių nedideliu atstumu vienas nuo kito, sistema vadinama **dipoliu**. Jį apibūdina dipolinis momentas \vec{p} :

$$\vec{p} = q\vec{l} \quad (1)$$

kur q yra kiekvieno krūvio absoliutinė vertė o vektorius \vec{l} – dipolio petys, absoliutine verte lygus atstumui tarp dipolio (taškinių) krūvių centrų ir nukreiptas iš neigiamo poliaus/krūvio link teigiamo.

Sąveiką dipolis-dipolis turime, kai dipolinės molekulės patenka į viena kitos elektrinį lauką. Molekulių dipolių pavyzdžiai parodyti 1 pav. Sąveika dipolis-dipolis yra silpna, lyginant su kovalentine jungtimi, bet tai viena iš stipriausių tarpmolekulinių sąveikų.



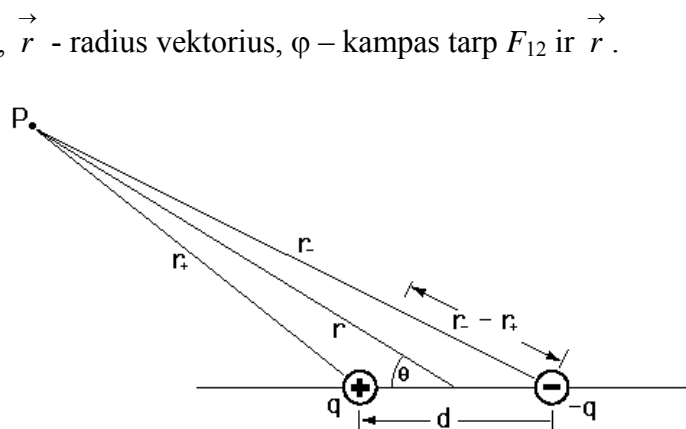
1 pav. Molekulių dipolių pavyzdžiai.

Pagrindinis vidumolekulinės ir tarpmolekulinės sąveikos matas yra **sąveikos energija**. Dviejų objektų (atomų, molekulių, daugiamolekulinių junginių), esančių atstumu r_{12} vienas nuo kito, sąveikos energija lygi darbui, kurį reikia atlikti norint tuos objektus priartinti iš begalybės iki atstumo r_{12} :

$$W = \int_{\infty}^{r_{12}} (\vec{F}_{12} \cdot \vec{r}) \frac{dr}{r} = \int_{\infty}^{r_{12}} F_{12} \left| \cos \varphi dr \right. \quad (2)$$

Čia F_{12} – jėga, veikianti tarp tų objektų, \vec{r} - radius vektorius, φ – kampas tarp F_{12} ir \vec{r} .

Tegu turim du nejudančius dipolius. Norint įvertinti sąveikos tarp šių dviejų dipolių energija, pirmiausia reikia žinoti pirmojo dipolio sukurto elektrinio lauko stiprumą \vec{E}_1 . Jį galima rasti pasinaudojant laukų superpozicijos principu: dipolio sukurtas laukas



1 pav. Dipolio kuriamo elektrinio lauko skaičiavimas. θ – kampas tarp radius vektoriaus ir dipolio dipolinio momento.

susideda iš dipolių sudarančių krūvių sukurtų laukų. Arba iš dipolio sukurto elektrinio lauko potencialo, kuris yra lygus

$$\varphi = \frac{p \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 \epsilon r^2}. \quad (3)$$

Čia θ – kampas tarp radius vektoriaus ir dipolio dipolinio momento.

Elektrinio lauko stiprį randame iš

$$\vec{E} = -grad \varphi = -\frac{\partial \varphi}{\partial r} \vec{r}_0 - \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \vec{\theta}_0 = \frac{2p \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 \epsilon r^3} \vec{r}_0 + \frac{p \sin \theta}{4\pi\epsilon_0 \epsilon r^3} \vec{\theta}_0 \quad (4)$$

Gauname, kad pirmojo dipolio kuriamas elektrinis laukas yra

$$\vec{E}_1 = \frac{\vec{p}_1}{4\pi\epsilon_0 \epsilon r^3} \sqrt{1 + 3 \cos^2 \theta} \quad (5)$$

Matome, jog dipolio sukurto lauko stipris mažėja atvirkščiai proporcingai trečiajam atstumo laipsniui ($\sim 1/r^3$). Sąveikos energija bus

$$W = -(\vec{p}_2 \vec{E}_1) = -|\vec{p}_2| |\vec{E}_1| \cos \psi, \quad (6)$$

Kur \vec{p}_2 yra antrojo dipolio dipolinis momentas, ψ yra kampas tarp \vec{E}_1 ir \vec{p}_2 .

Tokiu būdu gauname, kad sąveikos energija:

$$W = -\frac{p_1 p_2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon r} \sqrt{1 + 3 \cos^2 \theta} \cos \psi. \quad (7)$$

Taigi, dviejų nejudančių dipolių sąveikos energija atvirkščiai proporcinga atstumo tarp jų kubui ($\sim 1/r^3$).

Šiluminio judesio veikiamo dipolio efektyvus dipolinis momentas:

$$\vec{p} = \frac{p^2 |E|}{3kT} \quad (8)$$

Dviejų chaotiškai judančių sąveikaujančių dipolių tarpusavio sąveikos energija:

$$W = -\left(\vec{p} \vec{E} \right) = \frac{p^2}{3kT} E_1^2 \quad (9)$$

Taigi, gauname

$$W = -\frac{2}{3kT(4\pi\epsilon_0 \epsilon)^2} \frac{p_1 p_2}{r^6} \quad (10)$$

Vadinasi, judrių dipolių sąveikos energija atvirkščiai proporcinga r^6 , t.y., sparčiai mažėja, didėjant atstumui tarp judrių dipolių.

DARBO PRIEMONĖS:

1. Kompiuteris su prieiga prie interneto;
2. Programinė įranga ChemWiz;

DARBO EIGA:

Šiame darbe naudosimės ChemViz ir vaizdų apdorojimo įrangą, tam kad ištirti sąveiką dipolis-dipolis tarp dviejų HCl molekulių bei nustatyti atstumą tarp šių molekulių, nulemtą šios sąveikos. Tai atliksime trim etapais.

Pirmiausia nustatysime atskiros H-Cl molekulės kovalentinės jungties ilgį. Tam, sukursime grubaus mastelio 15-os kadru animaciją, vaizduojančią susiduriančius (atsitrenkiančius vienas į kitą) H ir Cl atomus. Gautų duomenų pagrindu, nubraižysime sąveikos energijos priklausomybę nuo atstumo. Pasinaudoję šia priklausomybe, apytiksliai nustatysime kurioje vietoje yra mūsų sistemos (H-Cl) energetinis minimumas. Energijos minimumas rodo, kad tarp dviejų atomų susidarė jungtis. Atstumas tarp H ir Cl atomų, atitinkantis energijos minimumą, parodo kovalentinės jungties tarp šių dviejų atomų ilgį. Sekančiame etape, tiksliau įvertinsime jungties H-Cl ilgį. Paskutiniame etape nustatysime sistemos H-Cl...H-Cl sąveikos dipolis-dipolis 'jungties' ilgį.

1 etapas: Atskiros H-Cl molekulės kovalentinės jungties ilgio nustatymas

1. Paleiskite programos ChemViz įrankį, "Waltz".
2. Sukurkite grubaus mastelio 15-os kadru animaciją, vaizduojančią susiduriančius (atsitrenkiančius vienas į kitą) H ir Cl atomus. Tam, iš periodinės elementų lentelės pasirinkite vieną H atomą ir vieną Cl atomą.
3. Iš meniu 'Skaičiavimų tipai' ("Calculation Types"), pasirinkite "Elektronų tankiai" ("Electron Densities") ir "Animacija" ("Animate By Position").
4. Antrame puslapyje pasirinkite kadru skaičių (*Number of Animation Frames*) "15" ir palikite standartines parametrų *Delays between Frames*, *Charge*, *Spin Multiplicity*, ir *Orbital Selection* vertes.
5. Nustatykite tokias kraštines elementų koordinates ("Element Coordinates"):
 - i) pradinė H atomo padėtis -2.0 Å;
 - ii) galinė H atomo padėtis -0.25 Å;
 - iii) pradinė Cl atomo padėtis +2.0 Å;

iv) galinė Cl atomo padėtis 0.25 Å.

Esant tokioms pradinėms atomų padėtimis, animacija bus pradėta, atomams esant 4.0 Å atstumu vienas nuo kito, ir baigsis, kai šiuos atomus skirs tik 0.5 Å.

6. Paleiskite "Gamess".

7. Žiūrėdami į energijos grafiką (*Energy Graph*), nustatykite jungties ilgį, esant mažiausiai sąveikos energijai. Tai bus jungties H-Cl apytikslis ilgis.

8. Užsirašykite įvertintą jungties ilgį: ____ Å.

2 etapas. Tikslusnis H-Cl molekulos kovalentinės jungties ilgio nustatymas

9. Analogiškai pirmame etape aprašytai procedūrai, sukurkite naują 15-os kadru animaciją, vaizduojančią susiduriančius (atsitrenkiančius vienas į kitą) H ir Cl atomus. Tačiau šį kartą kraštines elementų koordinatas parinkite artimas pirmame etape gautam jungties H-Cl apytiksliam ilgiui. Tai leis tiksliau įvertinti jungties H-Cl ilgį.

10. Paleiskite "Gamess".

11. Peržiūrėję sąveikos energijos grafiką ("*Energy Graph*"), nustatykite jungties H-Cl tikslesnį ilgį.

12. Užrašykite gautą geriausią H-Cl jungties ilgio vertę: ____ Å.

3 etapas: Sistemos H-Cl...H-Cl sąveikos dipolis-dipolis 'jungties' ilgio nustatymas

1. Sukurkite 21-o kadro animaciją, vaizduojančią susiduriančius (atsitrenkiančius vienas į kitą) dvi H-Cl molekules (H-Cl...H-Cl). Prisilaikykite aukščiau išdėstytos tvarkos. Supaprastinkite procedūrą, animacijos metu vieną H-Cl molekulę laikydami stacionariai vienoje vietoje, jos Cl atomui esant koordinatų pradžioje, t.y. taške (0,0,0). Pradžioje atstumą tarp pirmosios molekulos Cl atomo ir antrosios molekulos H atomo nustatykite lygų 5 Å. Pirmos molekulos Cl atomo galutines koordinatas pasirinkite lygias 3 Å nuo antros molekulos H atomo.

2. Paleiskite "Gamess".

3. Peržiūrėkite gautą energijos priklausomybės nuo atstumo grafiką ("*Energy Graph*") ir nustatykite energijos minimumo vietą. Užsirašykite gautą atstumo tarp dviejų Cl atomų vertę. Apskaičiuokite atstumą tarp Cl ir H atomų.

4. Užrašykite gautą sąveikos dipolis-dipolis 'jungties' ilgį: _____ Å.

KONTROLINIAI KLAUSIMAI:

1. Dipolio elektrinis laukas;
2. Sąveika dipolis-dipolis.

LITERATŪRA:

- 1) G. Saulis, „Biofizikos paskaitų konspektas“, Kaunas, 2005.
- 2) M. Venslauskas, Biofizika. Kaunas: KMA. 1996.
- 3) R. Glazer, Biophysics. – Berlin: Springer Verlag, 2001. - 361 p.