



**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

### **VANDENILINĖS SĄVEIKOS TYRIMAS**

#### **DARBO TIKSLAS:**

Susipažinti su tarpmolekuline vandeniline sąveika.

#### **DARBO UŽDUOTYS:**

1. Naudojant ChemWiz ir grafinės analizės įrangą, ištirti vandenilinę sąveiką tarp dviejų HF molekulių;
2. Nustatyti atstumą tarp dviejų HF molekulių, nulemtą vandenilinės sąveikos.

## TEORIJA:

### Tarpmolekulinės jėgos

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  $r_{12}$ :

$$W = \int_{\infty}^{r_{12}} (\vec{F}_{12} \cdot \vec{r}) \frac{dr}{r} = \int_{\infty}^{r_{12}} F_{12} \left| \cos \varphi \right| dr \quad (1)$$

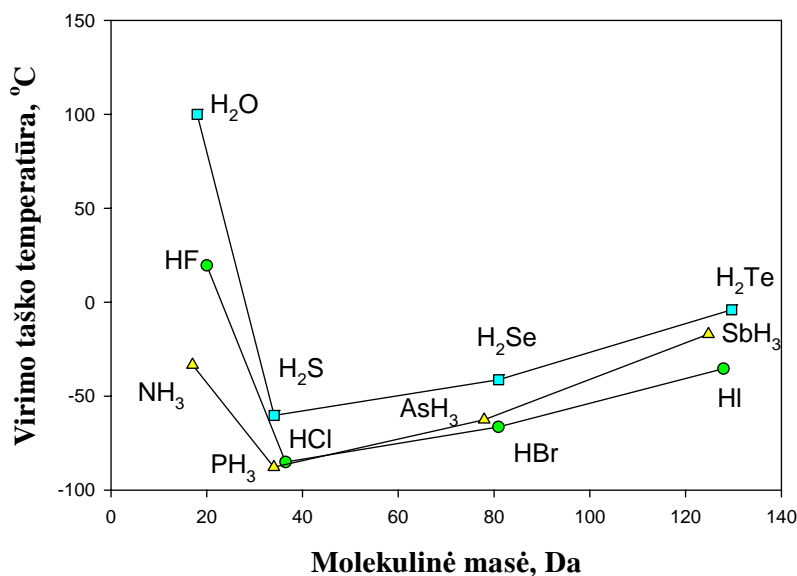
Čia  $F_{12}$  – jėga, veikianti tarp tų objektų,  $\vec{r}$  – radius vektorius,  $\varphi$  – kampas tarp  $F_{12}$  ir  $\vec{r}$ .

Dviejų biologinių makromolekulių sąveikos energija gali būti keliasdešimt kartų mažesnė už kovalentinės bei joninės jungties energiją. Makromolekulės erdvinė struktūra turi būti pakankamai stabili, kad jos nepažeistų šiluminiai atomų ar molekulių judesiai. Tuo pat metu, Dviejų biologinių makromolekulių sąveikos energija yra kelis ar keliolika kartų didesnė už molekulės šiluminio judesio energiją, kadangi biologinė molekulė turi būti pakankamai dinamiška, sugebanti reaguoti į aplinkos poveikį.

### Vandenilinė sąveika

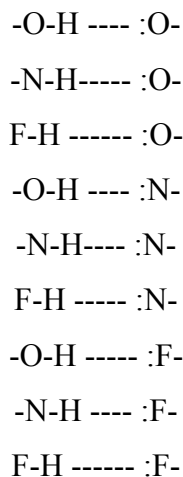
Tam tikros medžiagos, pvz.,  $H_2O$ ,  $HF$ ,  $NH_3$  sudaro vandenilines jungtis, kurių susiformavimas veikia medžiagos savybes. Junginiai, turintys  $OH$  ir  $NH_2$  grupes taip pat sudaro vandenilines jungtis. Daugelio organinių junginių, tokių kaip alkoholiai, rūgštys, amino rūgštys ir kt., molekulėse yra šios grupės, todėl vandenilinė jungtis vaidina svarbų vaidmenį biologinėse sistemose.

1 pav. pavaizduota įvairių junginių, savo sudėtyje turinčių vandenilio jonų, virimo taškų priklausomybės nuo junginio molekulinės masės. Matome, kad, mažėjant junginio



1 pav. Įvairių junginių virimo temperatūros.

molekulinei masei, jis užverda prie žemesnės temperatūros. Tačiau H<sub>2</sub>O, HF ir NH<sub>3</sub> virimo taškai yra daug aukščiau nei turėtų būti, jei tokia pati tendencija galėtų ir šiems junginiams. Tokias anomalias šių junginių savybes lemia tai, kad tarp jų molekulių susiformuoja vandenilinės jungtys. Vandenilinės jungtys (pažymėtos "-----") formuojasi tarp šių grupių:



Kiekvienu aukščiau parodytu atveju vandenilio atomas yra kovalentiškai susijungęs su vienu iš elektroneigiamiausių atomų - F, O arba N. Biologijoje dažniausiai sutinkama vandenilinė sąveika tarp vandenilio ir deguonies bei azoto.

Savo prigimtimi vandenilinė sąveika yra sąveika dipolis-dipolis. Tačiau vandenilinė sąveika yra stipresnė nei paprasta sąveika dipolis-dipolis. Vandenilio jonas H<sup>+</sup> yra labai mažas, todėl sąveikaujantys dipoliai gali labai priartėti vienas prie kito. Kadangi sąveikos energija tarp dipolių sparčiai mažėja, didėjant atstumui tarp jų, trumpesnės jungtys yra stipresnės. Vandenilinės sąveikos atskira dedamoji, be abejo, yra ir dispersinė sąveika. Tačiau ji sudaro tik nedidelę dalį bendros vandenilinės sąveikos energijos.

#### *Vandenilinė sąveika DNR molekulėje*

DNR yra dvigubai 'suvyta' makromolekulė: dvi polinukleotidinės grandinės, jungiamos silpnomis sąveikomis, suformuoja DNR molekulę. DNR „stuburas“ yra polimeras su besikeičiančiomis cukraus-fosfato sekomis. Dezoksiribozės cukrūs 3'-hidroksil ir 5'-hidroksil grupėmis yra prisijungę prie fosfatų grupių esterio arba fosfodiesterio jungtimis.

DNR dviguboje spiralėje tarp adenino ir timino, esančių priešingose spiralės grandinėse formuojasi dvi vandenilinės jungtys. DNR dviguboje spiralėje tarp guanino ir citozino, esančių priešingose spiralės grandinėse formuojasi trys vandenilinės jungtys.

## 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 vandenilinę sąveiką tarp dviejų HF molekulių bei nustatyti atstumą tarp vienos molekulės vandenilio atomo ir kitos molekulės fluoro atomo, nulemtą šios sąveikos (vandenilinės jungties ilgį). Tai atliksime trim etapais.

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

### 1 etapas: Atskiros H-F 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 F atomus. Tam, iš periodinės elementų lentelės pasirinkite vieną H atomą ir vieną F 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 koordinatas ("Element Coordinates"):
  - i) pradinė H atomo padėtis -3.5 Å;
  - ii) galinė H atomo padėtis -0.25 Å;

iii) pradinė F atomo padėtis  $+3.5 \text{ \AA}$ ;

iv) galinė F atomo padėtis  $0.25 \text{ \AA}$ .

Esant tokioms pradinėms atomų padėtimis, animacija bus pradėta, atomams esant  $7.0 \text{ \AA}$  atstumu vienas nuo kito, ir baigsis, kai šiuos atomus skirs tik  $0.5 \text{ \AA}$ .

6. Paleiskite "Gamess".

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

8. Užsirašykite įvertintą jungties ilgį: \_\_\_\_\_  $\text{ \AA}$ .

### **2 etapas. Tikslusnis H-F molekulės kovalentinės jungties ilgio nustatymas**

9. Analogiškai pirmame etape aprašytai procedūrai, sukurkite naują 15-os kadro animaciją, vaizduojančią susiduriančius (atsitrenkiančius vienas į kitą) H ir F atomus. Tačiau šį kartą kraštines elementų koordinates parinkite artimas pirmame etape gautam jungties H-F apytiksliam ilgiui. Tai leis tiksliau įvertinti jungties H-F 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: \_\_\_\_\_  $\text{ \AA}$ .

### **3 etapas: Sistemos H-F...H-F vandenilinės 'jungties' ilgio nustatymas**

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

2. Paleiskite "Gamess".

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

4. Užrašykite gautą vandenilinės sąveikos nulemtą 'jungties' ilgį: \_\_\_\_\_  $\text{ \AA}$ .

**KONTROLINIAI KLAUSIMAI:**

1. Jono elektrinis laukas;
2. Vandens molekulė kaip dipolio pavyzdys;
3. Vandenilinės sąveikos prigimtis.
4. Junginių, savo sudėtyje turinčių vandenilio jonų, virimo taškų temperatūrų priklausomybės nuo junginio molekulinės masės.

**LITERATŪRA:**

- 1) G. Saulis, „Biofizikos paskaitų konspektas“, Kaunas, 2005.
- 2) M. Venslauskas, Biofizika. Kaunas: KMA. 1996.
- 3) M.B. Jackson, Molecular and Cellular Biophysics, Cambridge University Press, Cambridge, 2006. -512 p.
- 4) R. Glazer, Biophysics. – Berlin: Springer Verlag, 2001. - 361 p.