

**ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС
ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ**

ТОШКЕНТ КИМЁ – ТЕХНОЛОГИЯ ИНСТИТУТИ

«ФИЗИКА ВА ЭЛЕКТРОТЕХНИКА» КАФЕДРАСИ

**«ФИЗИК – КИМЁВИЙ ТАХЛИЛНИНГ ЗАМОНАВИЙ
УСУЛЛАРИ» ФАНИДАН**

РЕФЕРАТ

МАВЗУ: Молекулалараро кучлар

ТОПШИРДИ:

УСМОНОВ Д.А. М12 - 10

КАБУЛ КИЛДИ:

КОСИМЖОНОВ М.А.

ТОШКЕНТ 2010

МАВЗУ: МОЛЕКУЛАЛАРАРО КУЧЛАР

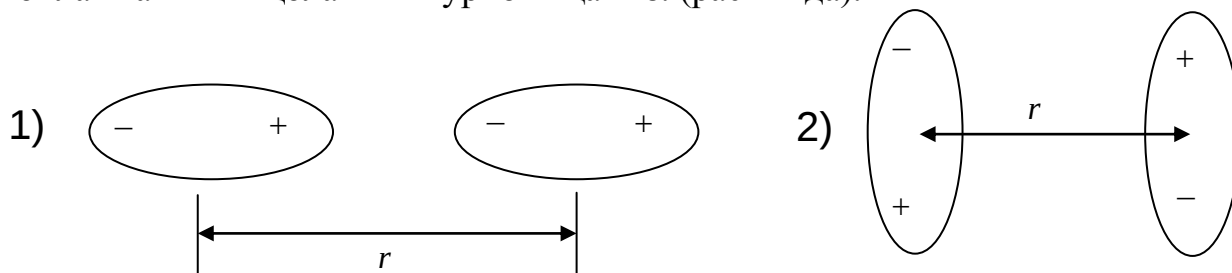
РЕЖА:

1. *Дипол – дипол таъсирлашиш.*
2. *Дипол ва индуцирланган дипол ўртасидаги ўзаро таъсир.*
3. *Дисперсион (лондон) кучлари.*
4. *Водород боғланиш.*

МОЛЕКУЛАЛАРАРО КУЧЛАР

II – бобда ковалент боғланишларни ва атомларни бир – бирига атом орбиталларининг устма – уст тушиш ҳисобига тортиб турувчи (боғлаб турувчи) кучларнинг пайдо бўлиш табиатини кўриб чикдик. Энди бу бобда молекулалар ўзаро қандай кучлар билан таъсирлашишини кўриб чиқамиз.

Дипол – дипол таъсирлашиш. Агар молекулаларнинг ўзгармас дипол моменти бўлса, уларнинг ўзаро таъсири дипол – дипол таъсирлашиш деб аталади. **Эслатиб ўтамиз:** Икки бирхил ва ишораси ҳархил q зарядлар r масофада жойлашган бўлса уларнинг дипол моменти деб $\vec{\mu} = q\vec{r}$ ифодага айтилади. Демак, молекулада дипол моменти пайдо бўлиши учун, унда мусбат ва манфий зарядларнинг оғирлик маркази бир – бирига нисбатан сурилган бўлиши керак. Ана энди бир – биридан r масофада жойлашган икки μ_A ва μ_B диполнинг таъсирлашувини топамиз. Уларнинг энг қулай жойлашган икки ҳолатини кўриб чиқамиз: (расм 1 да).



Расм 1

Чап тарафдаги диполларнинг ориентацияси учун уларнинг таъсирлашув энергияси куйидагича бўлади:

$$W = -\frac{2\mu_A\mu_B}{\epsilon r^3} \quad (1)$$

Ўнг тарафдагиси учун эса:

$$W = -\frac{\mu_A\mu_B}{\epsilon r^3} \quad (2)$$

бу ерда ϵ - диэлектрик сингдирувчанлик, минус ишораси эса молекулаларнинг бир – бирига тортишишини билдиради:

Агар диполлардан бирининг ишорасини ўзгартирсак унда молекулалар ўзаро итаришади.

Макроскопик системаларда, масалан газ ёки суюқликларда, диполлар ҳархил ориентацияда бўлиши мумкин, улар орасида ҳам тортишиш, ҳам итариш кучлари бўлиши мумкин, шунинг учун ўрта ҳисобда уларнинг ўзаро таъсир энергияси нўлга тенг бўлиши керак. Лекин Больцманнинг тақсимооти қонунига биноан энергетик нуқтаи назардан ўзаро қулай ориентацияга эга

бўлган молекулалар ноқулай ориентацияга эга бўлганларидан $\exp\left(-\frac{\mu_A\mu_B}{\epsilon r^3 kT}\right)$

марта кўпдир. Шу нуқтаи назардан аниқроқ қилиб бажарилган ҳисобларга қараганда ўзгармас диполларнинг ўзаро таъсир энергиясининг ўртача қиймати тенг:

$$W = -\frac{2}{3} \frac{\mu_A^2 \mu_B^2}{\epsilon^6} \frac{1}{kT} \quad (3)$$

Бу ерда энди энергия масофанинг олтинчи даражасига тесқари пропорционалдир, ҳудди шундай аҳвол температурага нисбатан ҳам. Демак, температура ошган сари молекулаларнинг ўртача кинетик энергияси ҳам ошади ва бир – бирига тортишиш учун керак бўладиган ориентация эҳтимоллиги камаяди, демак тортиш кучлари камаяди, бу эса W нинг ҳам абсолют қийматининг камайишига олиб келади.

Дипол ва индуцирланган дипол ўртасидаги ўзаро таъсир Агар электрон булути ядро атрофида сферик симметрия бўйича тақсимланган бўлса, у ҳолда мусбат ва манфий зарядларнинг оғирлик марказлари битта нуқтада (ядро) бўлади ва бу атомнинг дипол моменти нолга тенг бўлади. Лекин шу атом ёнига битта мусбат заряд жойлаштирилса, аҳвол ўзгаради, зарядлар сурилиб дипол моменти пайдо бўлади (расм 2 га қаранг).



Расм 2.

а) мусбат заряд таъсирида дипол моменти индуцирланади.

б) ўзгармас дипол таъсирида дипол моментининг ҳосил бўлиши

Индуцирланган дипол моменти электр майдоннинг кучланганлигига тўғри пропорционал:

$$\mu_{\text{инд}} \sim E = \alpha E \quad (5)$$

α - пропорционаллик коэффициенти – кутбланувчанлик (поляризацияланувчанлик) деб аталади. Бу коэффициент атом ёки молекуладаги электрон булути қанчалик осонлик билан майдон таъсирида сурилишини билдиради. Одатда молекуланинг размери катта бўлган сари унинг кутбланувчанлиги ҳам катталашаверади. Ўзгармас дипол ҳам молекулада дипол моментини индуцирлайди (расм 2 б га қаранг). Ўзгармас дипол ва индуцирланган диполларнинг ўзаро таъсир энергиясини 1920 йилда Дебай топган:

$$W = -\frac{2\alpha\mu^2}{\epsilon^6} \quad (5)$$

Бу ерда ҳам минус ишора диполларнинг бир – бирига тортилишини билдиради.

Дисперсион (лондон) кучлари. Шу пайтгача биз атом ёки молекулада дипол моменти пайдо бўлиши учун уларнинг ёнида бирорта заряд ёки ўзгармас дипол моменти бўлиши шартлигини кўрдик. Акс ҳолда дипол моменти юзага келмаслиги керак. Лекин нега атомлари дипол моментига эга бўлмаган газлар (нополяр газлар), масалан азот ва гелий, конденсация бўлиб суюқликка айланишлари мумкин? Қандай қилиб нейтрал атомлар ўртасида тортиш кучлари пайдо бўлади?

Нейтрал (нополяр) атомларда электронлар сферик симметрияга эга деганимизда, албатта, биз электрон булутининг ўртача, вақтга боғлиқ бўлмаган ҳолатини кўзда тутиб гапирамиз. Бунда электрон булут кимирамайдиган (қотиб қолган) ҳолда бўлади. Лекин атомлар хаотик ҳаракатда бўлгани учун улар ўзаро бир – бирига урилиб туриладилар, шунда электрон булут ҳам ўз мувозанат ҳолидан чиқиб кетиши ва тебранабошлаши мумкин. Демак, сферик симметрия бузулади ва қисқа вақт яшайдиган дипол моменти ҳосил бўлади. Бу дипол моменти, ўз навбатида, қўшни атомларда дипол моментларини индуцирлайди (чакиради). Натижада қўшни атомлар ўртасида тортишиш кучлари пайдо бўлади. Албатта, бу кучлар анча кичик бўлади. Масалан, гелий 4 К° да қайнайбошлайди. Демак, бу температурада тортиш кучлари гелий атомларини бирга ушлаб тураолмайди, бунинг учун температура 4 К° дан кичик бўлиши керак. Агар қутбланувчанлик катта бўлса, тортиш кучлари ҳам катта бўлади.

1930 йилда инглиз олими Лондон дипол – дипол ўзаро таъсирини назарий жиҳатдан ўрганди. Квант механикасининг нуқтаи назаридан икки бундай диполларнинг ўзаро таъсир энергияси қуйидагига тенг экан:

$$W = -\frac{3}{4} \frac{I \alpha^2}{r^6}, \quad (6)$$

бу ерда α - қутбланувчанлик, I - атомнинг ёки молекуланинг биринчи ионизация потенциали. Агар молекулалар ҳар хил бўлса (6) ифода қуйидаги кўринишга эга бўлади;

$$W = -\frac{3}{2} \frac{I_A I_B}{I_A + I_B} \frac{\alpha_A \alpha_B}{r^6} \quad (7)$$

Тортиш кучларидан ташқари яна итариш кучлари ҳам бўлиши керак, акс ҳолда молекулалар бир – бирига ёпишиб қолади. Бундай кучлар қўшни атомлар (ёки молекулалар) даги электрон булутлари ёки ядролари ўртасидаги мавжуд итариш кучларидир. Итариш энергияси масофага қуйидагича боғланган:

$$W_{um} \sim \frac{1}{r^n} \quad (8)$$

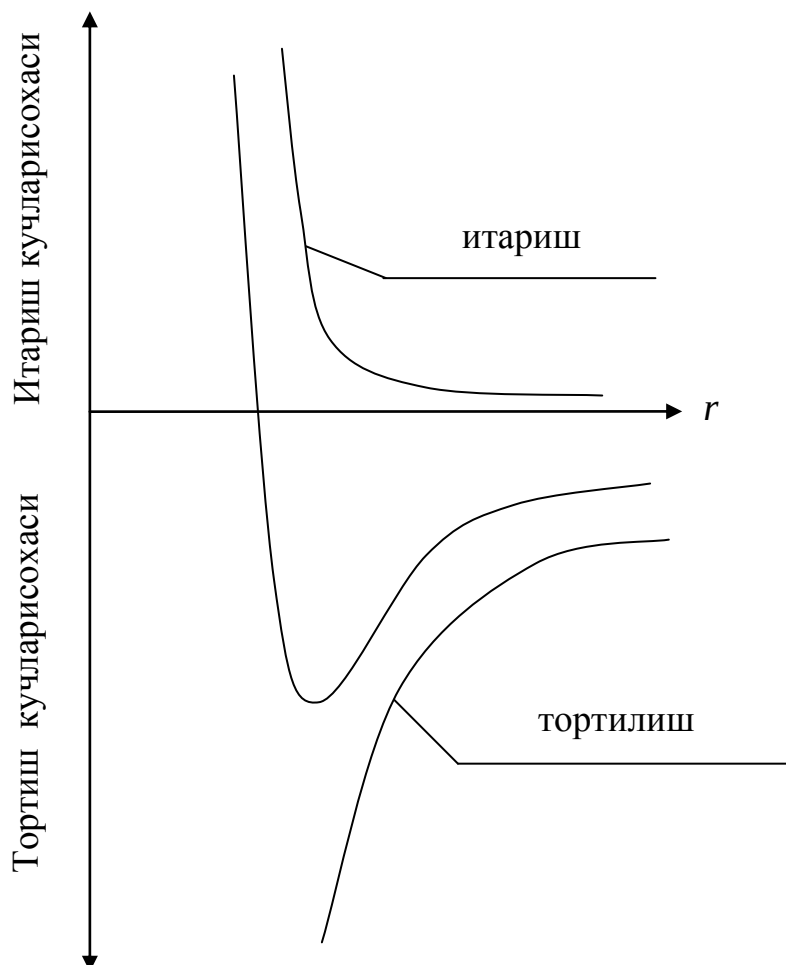
бу ерда $n \approx 9 \div 12$ интервалда бўлади. Жонс деган олим ўзаро таъсир умумий энергиясининг қуйидаги кўринишини таклиф қилди:

$$W_t = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}} \quad (9)$$

бу ерда A ва B лар ўзаро таъсир этувчи атомлар ёки молекулалар учун ўзгармас параметрлар. Амалда кўпинча (3.9) нинг ўрнига бошқа ифода ишлатилади:

$$W_t = -\frac{A}{r^6} + Be^{-\alpha r} \quad (10)$$

Бу формулада итариш кучлари экспонента билан берилади. Унинг графиги Расм 3 да кўрсатилган.



Расм 3. Икки молекула ўртасидаги тортилиш ва итарилишга тегишли потенциал энергия графиги.

Биз шу давргача молекулалар ўртасида қуйидаги кучлар ҳосил бўлишини кўриб чиқдик:

- ўзгармас дипол ва индуцирланган дипол ўртасида
- ион ва индуцирланган дипол ўртасида
- Лондон дисперсион кучлар ва итариш кучлари.

Шу ва шунга ўхшаш кучлар Вандерваалс кучлари деб аталади. Лондон (ёки дисперсион) кучлар ҳар доим тортилишга олиб келадилар, молекулаларнинг ўзаро жойлашиши (ориентацияси) қандай бўлишидан қатий назар. Илмий адабиётда вандерваалс радиуси деган тушунча бор. Бу радиус

атом ва молекулалар бир – бирига максимал равишда яқинлашгандаги улар орасидаги масофага айтилади (бунда улар ўртасида ҳали кимёвий боғланиш пайдо бўлмаган бўлади).

Жадвалда ҳархил атомлар учун вандерваалс радиуслари келтирилган.

Атом	Радиус, $\text{\AA}$
<i>H</i>	1,1
<i>C</i>	1,5
<i>N</i>	1,5
<i>O</i>	1,4
<i>P</i>	1,9
<i>S</i>	1,85
<i>F</i>	1,35
<i>Cl</i>	1,8
<i>Br</i>	1,95
<i>I</i>	2,2
<i>-CH₃</i>	2,0

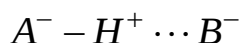
Дисперсион кучлар табиатда, айниқса тирик организмда кўп кузатилади, катта молекулаларда муҳим аҳамият касб этади. Масалан, оксил моддасининг структурасини ушлаб туришда. Маълумки, оксилнинг учламчи структураси асосан нополяр группалар ўртасидаги контакт туфайли сақланиб туради. Мембраналарда липид молекулаларининг углеводород занжирлари ўртасидаги ўзаро таъсир дисперсион характерга эга. Жадвалда базибир заррачалар ўртасидаги ўзаро таъсир хиллари ва уларнинг масофага боғлиқлиги келтирилган.

Ўзаро таъсир хили	Масофага боғлиқлик	Мисол	Боғланиш энергияси кЖ/моль
Ковалент боғланиш	Оддий ифода йўқ	<i>H – H</i>	200 – 800
Ион – ион	$\frac{e^2}{\epsilon r}$	<i>Na⁺Cl⁻</i>	40 – 400
Ион – дипол	$\frac{e\mu}{\epsilon r^2}$	<i>Na⁺(H₂O)⁻</i>	4 – 40
Дипол – дипол	$\frac{2\mu_1^2\mu_2^2}{3\epsilon^6kT}$	<i>SO₂ SO₂</i>	0,4 – 4
Дипол – индуцирланган дипол	$\frac{2\mu^2}{\epsilon^6}$	<i>HCl C₆H₆</i>	0,4 – 4
Дисперсион кучлар	$\frac{3 I\alpha^2}{4 r^6}$	<i>He – He</i>	4 – 40
Водород боғланиш	Оддий ифода йўқ	<i>H₂O...H₂O</i>	4 – 40

Водород боғланиш. Водород боғланиш табиатда кўп учрайдиган ва молекулалар ўртасида бўладиган ўзаро таъсирнинг алоҳида аҳамиятга эга бўлган хилидир. Агар дипол моментида эга бўлган молекула (поляр молекула) ўз таркибида водород атомига эга бўлса (масалан $O-H$ ёки $N-H$ фрагментли молекула) ва электрманфий атомлар билан таъсирлашса, масалан, O , N , F ёки Cl билан, шу ҳолда водород боғланиш пайдо бўлади. Бу ўзаро таъсир қуйидагича белгиланади:

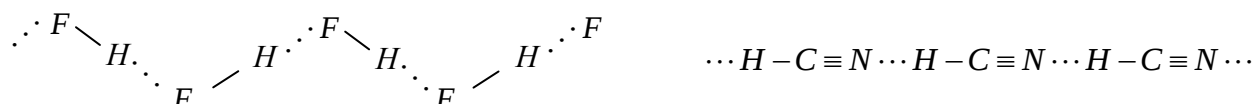


бу ерда A ва B - электрманфий атомлар, пунктир эса водород боғланишини билдиради. Умуман олганда, келтирилган формулани заряд ишораларини келтириб ҳам ёзса бўлади:



A ва B лар электрманфий атомлар бўлгани учун улар ёнидаги атомларнинг электронларини ўзига тортиб оладилар ва манфий ионга айланадилар. Масалан, бу ерда A водород атомидан электронни ўзига тортади, шунда электрон булути A га қараб силжийди ва водород атомида протон ёлғиз ўзи қолади. Шунда H^+ билан унинг ёнида турган манфий атом B^- билан электростатик боғланиш пайдо бўлади. Водород боғланишнинг энергияси тахминан 40 кЖ/моль га тенг ва у кўп моддаларнинг хоссаларига катта таъсир кўрсатади. Масалан, у моддаларнинг қайнаш температурасини ўзгартириб юборади. Одатда турдош бўлган моддаларда қайнаш температураси молекуляр масса ошган сари ортиб боради, лекин H_2O , H_2S , H_2Se , H_2Te қаторда бу қонуният бажарилмайди: 373 , 213 , 231 ва 271 К . Сувдаги қайнаш температурасининг аномал даражада юқорилиги сув молекулалари ўртасидаги водород боғланишнинг борлигидир.

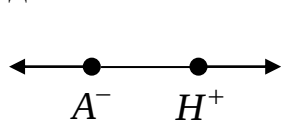
Нима учун бундай боғланиш фақат водород иштирокида юз беради? Сабаби шундаки, водород атомида фақат битта электрон бор. Бу электрон ковалент боғланиш учун ишлатилса ва бу боғланиш электрманфий атом билан юз берса, водород ядроси протон ёлғизланиб қолади, унинг электрон булути томонидан экранировка қилиниши жуда камайиб кетади. Демак, натижада протон бошқа электрманфий атом билан таъсирлашиши мумкин. Водород боғланишнинг кучига боғлиқ равишда бундай боғланиш қаттиқ ҳолда, суюқ ёки газ ҳолатда бўлиши мумкин. Масалан, HF ва HCN моддалар фақат суюқ ҳолда H - боғланишга эгадирлар:



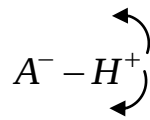
Водород боғланишнинг максимал турғунлиги атомлар бир тўғри чизик бўйлаб жойлашса бўлади: $A-H \cdots B$. Суюқликда водород боғланиш Инфрақизил (Иқ) спектроскопия ёрдамида аниқланади. Водород боғланиш

AH ва B лар ўртасидаги масофани $0,2 \div 0,3 \overset{o}{\text{Å}}$ га камайтиради ва шунинг

учун валент тебранишлар частотаси камаяди ва деформацион тебранишлар частотаси эса ошади.



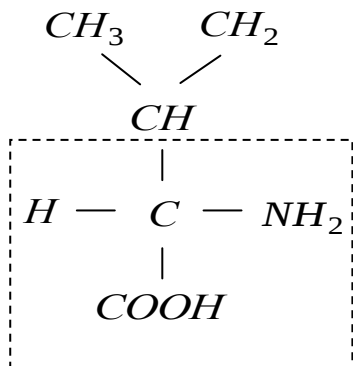
Валент
тебранишлар



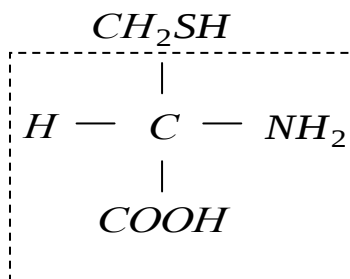
Деформацион
тебранишлар

ИҚ спектри пикининг кенглиги ва интенсивлиги ҳам водород боғланиш таъсирида ортиши мумкин.

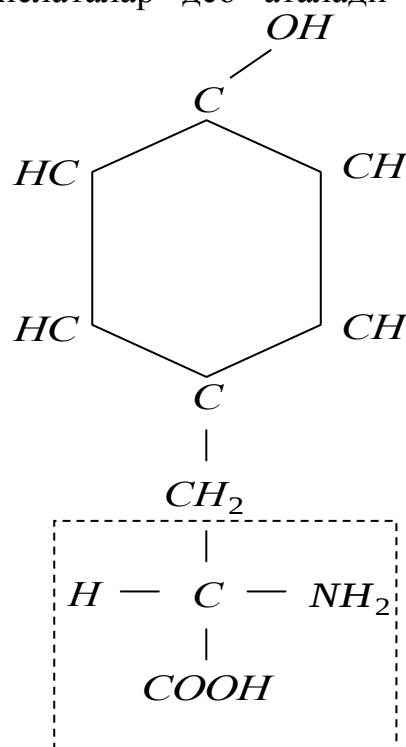
Водород боғланиш молекуланинг ичида ҳам бўлиши мумкин. Бунга мисол қилиб оксил молекуласини келтириш мумкин. Оксил полимер бўлиб, унинг молекуласи маълум группаларнинг (мономерларнинг) кетма – кет уланишидан ҳосил бўлади. Оксиллар бир – бирига ўхшаш бирнеча хил мономерлардан тузилган. Бу мономерлар аминокислаталар деб аталади (расмга қаранг)



Валин (вал)

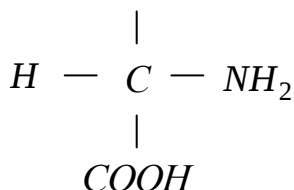


Цистеин (цис)



Тирозин (тир)

Ҳарбир аминокислата икки қисмдан иборат. Биринчи қисм ҳамма аминокислаталарда бирхил:



Бунда NH_2 - аминогруппа, $-COOH$ эса карбоксил группа деб аталади. Молекуланинг иккинчи қисми ҳамма аминокислоталарда ҳархил, у радикал деб аталади. Фанга ҳаммаси бўлиб 20 та аминокислота маълум.

Оқсил молекуласи ҳосил бўлаётганда аминокислоталар бир – бирига ҳамма аминокислоталар учун умумий бўлган гуруппировка ёрдамида бирлашади (расм 4 га қаранг).

Битта аминокислотанинг карбоксил группасидан ва қўшни аминокислотанинг аминогруппасидан сув молекуласи ажралиб чиқади ва бўшаб қолган валентликлар ҳисобига аминокислоталар қолдиқлари бирлашадилар. Аминокислоталар ўртасида мустаҳкам $\text{HN}-\text{CO}$ пептид боғланиш деб ном олган ковалент боғланиш пайдо бўлади. Иккита аминокислоталардан пайдо бўлган пептид дипептид, учта аминокислоталардан пайдо бўлгани трипептид, кўп аминокислоталардан пайдо бўлгани полипептид деб аталади. Ҳамма оқсиллар полипептидлардир, бошқача айтганда улар юзлаб ва балки минглаб аминокислоталардан тузилган занжирлардир.

Оқсиллар ҳархил бўлади. Ҳарбир тирик организмда хилмахил оқсиллар бўлади. Оқсилларнинг физикавий ва кимёвий ҳоссаларининг ҳархиллиги улардаги аминокислоталарнинг ҳархиллигидан ва уларнинг оқсил занжирида ҳархил кетма – кетликда келишидандир.

Битта аминокислотанинг ўлчами тахминан 0,40 нм бўлади, демак оқсил молекуласи 1000 та аминокислотадан тузилган бўлса, унинг узунлиги 400 нм бўлиши керак. Лекин оқсил молекуласининг размери ундан анча кичик, баъзибирлари шарикка ўхшаш думолоқ бўладилар, диаметри $5 \div 10$ нм атрофида. Демак, полипептид занжир шундай тахланган ёки бурилиб жойлашган бўладики, натижада у кичраяди. Ҳарбир оқсил ўзича тахланади, бошқаларга ўхшамайди. Оқсил молекуласининг тузилишини характерлаш учун унинг бирламчи, иккиламчи ва учламчи структурасини билиш керак.

Молекулада аминокислоталарнинг кетма – кет жойлашиши унинг бирламчи структурасини беради. Бу структура оқсил молекуласининг формуласини беради, деса бўлади:

лиз – глу – тре – ала – ала – лиз -

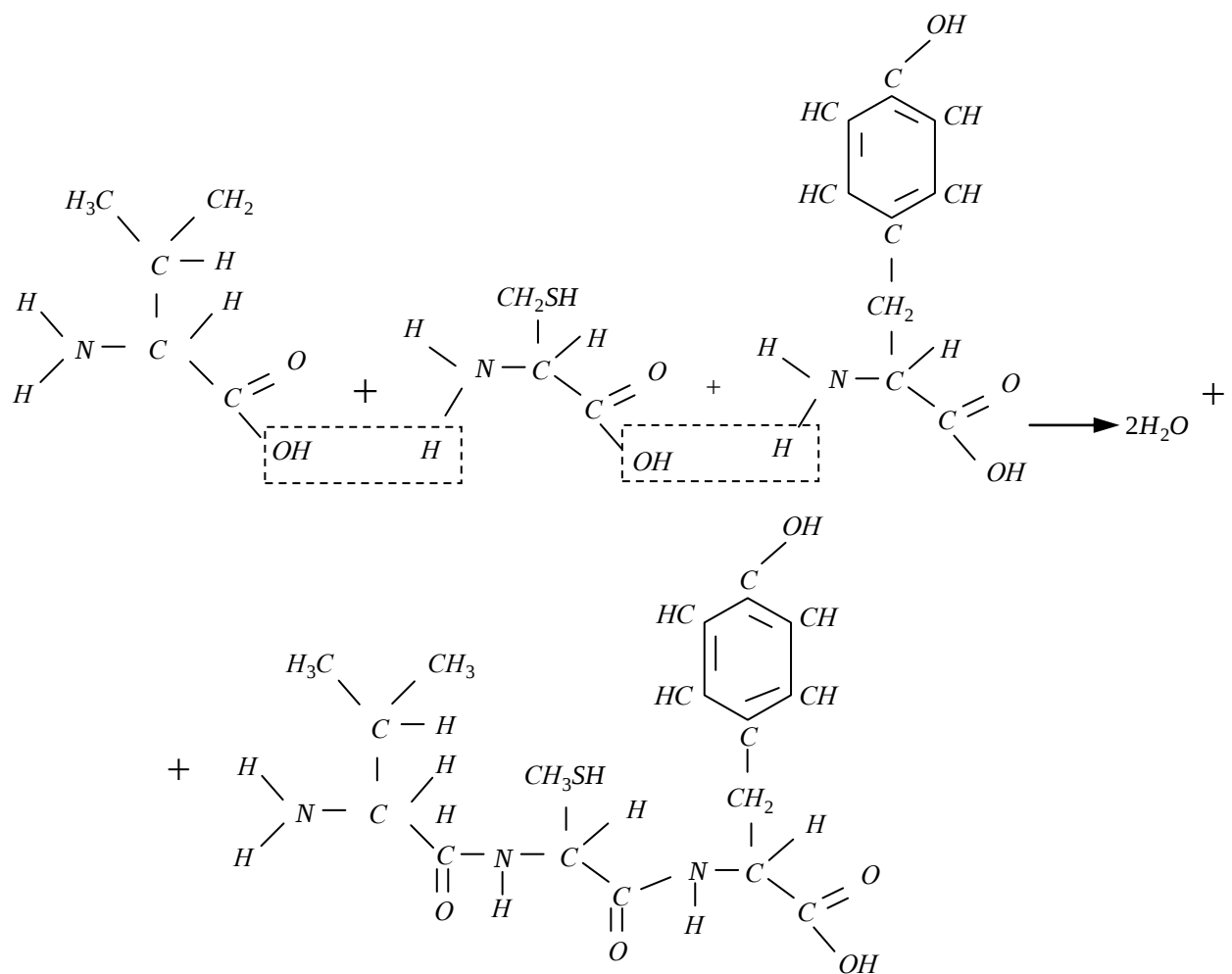
(лиз – лизин, глу – глутамин кислотаси, тре – треонин, ала – аланин).

Лекин кўпинча полипептид занжири бутунлай ёки қисман спирал шаклида вужудга келади. Бу оқсил молекуласининг иккиламчи структурадир.

Бу структурада аминокислота радикаллари спиралнинг ташқарисида бўладилар. Спиралнинг ўрамлари бир – бирига анча яқин жойлашадилар. Битта ўрамдаги NH группа билан қўшни ўрамдаги CO группа ўртасида водород боғланиш вужудга келади:

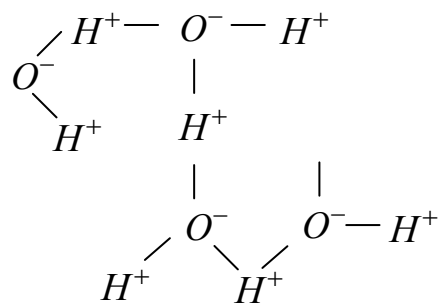


Водород боғланиш кучсиз бўлишига қарамасдан у тез – тез учраб турса (спирал бўйлаб), бу боғланиш спирални анча мустаҳкам қилиб қўяди. Полипептид спирали бошидан охиригача кўпсонли H - боғланишлар билан гўёки тикиб қўйилгандекдир, шунинг учун у анчагина мустаҳкамдир.



Расм 4

Водород боғланишига яна битта мисол – сув. Сув хона хароратида (ўзининг тузилишига мувофиқ) газ ҳолатда бўлиши керак, лекин H - боғланишлар туфайли унинг қайнаш температураси $100^{\circ}C$ га тенгдир, 1 атм. босимда.



Умуман олганда H - боғланишлар сабабли бир стакан сувни ҳам жуда катта макромолекула деб қараш мумкин.

АДАБИЁТЛАР

1. Г. Грей «Электроны и химическая связь». Издательство «Мир», Москва. 1967 г.
2. Г. Эйринг, Дж. Уолтер «Квантовая химия». Издательство «Мир», Москва. 1978 г.
3. М.А. Ельяшевич «Атомная и молекулярная спектроскопия». Москва. Физматиз, 1962 г.
4. А.Л. Букаченко, А.М. Вассерман «Стабильные радикалы». Москва. Химия 1973 г.
5. Т.И. Лихтенштейн «Метод спиновых меток в молекулярной биологии». Издательство «Наука», Москва. 1974 г.
6. Г. Чанг «Физическая химия с приложениями в биология». Издательство «Мир», Москва. 1980 г.
7. Л.П. Казаченко «Молекулярная спектроскопия жидкостей». Издательство БГУ (Минск). 1978 г.
8. С.Н. Андреев, М.Ф. Смирнова «Строения электронных оболочек атомов, теория химической связи». Издательство Ленинградского Университета, 1974 г.