

Электрический диполь

Дипольный момент $\mu = q l$, где l - расстояние между зарядами.

Для системы из n зарядов q_i радиусы-векторы которых r_i , дипольный момент равен:

$$\mu = \sum_{i=1}^n q_i r_i.$$

Единица дипольного момента, равная произведению заряда электрона на длину химической связи (см) называется **дебаем, Д**

В молекулах и молекулярных системах центры положительных зарядов q_A совпадают с положениями атомных ядер (радиусы-векторы r_A), а электронное распределение описывается плотностью вероятности $\rho(r)$.

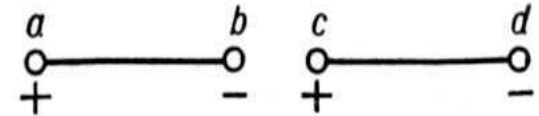
Вектор дипольного момента направлен от центра тяжести отрицательных зарядов к центру тяжести положительных.

Вандерваальсово взаимодействие

Ориентационные силы

Энергия диполь-дипольного взаимодействия равна:

$$W_{\text{дд}} = - p_1^2 p_2^2 / 6 \pi \epsilon_0 \epsilon k T r^6$$



где p_1 и p_2 - дипольные моменты взаимодействующих молекул;

r - расстояние между молекулами (диполями)

k - постоянная Больцмана;

T - температура;

$\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м - электрическая постоянная

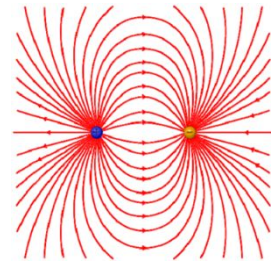
ϵ - относительная диэлектрическая проницаемость среды.

Индукционное взаимодействие (наведенное)

Молекула имеющая постоянный дипольный момент, способна индуцировать его в соседней молекуле.

Энергия индукционного взаимодействия равна:

$$W_{\text{инд}} = - \alpha p^2 / 2 \pi \epsilon_0 \epsilon r^6$$



где α - поляризуемость молекулы или атомной группы

p - дипольный момент

Дисперсионные взаимодействия

$$W_{\text{дисп}} = - \frac{2 I_1 I_2}{3 (I_1 + I_2)} * \alpha_1 \alpha_2 / r^6$$

где I_1 и I_2 - потенциалы ионизации групп;
 α_1 и α_2 - поляризуемости групп.

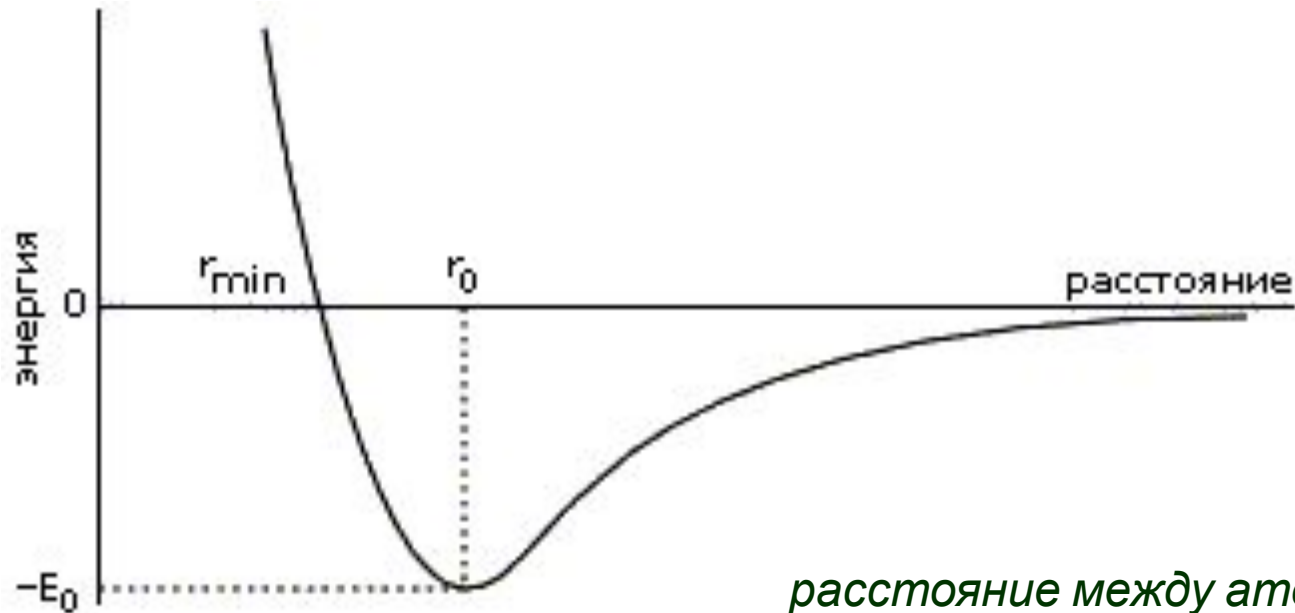
1	2		1	2		1	2
-	-		-	-		-	-
+	+	хуже чем	+	+	ИЛИ	+	+
1	2		1	2		1	2

Электрическая энергия растет с
уменьшением расстояния r как $1/r$

Согласованное колебание электронов (квантовый эффект) понижает энергию системы

Значение энергии притяжения обратно пропорционально r^6 : $(1/r)^6$

Значение энергии отталкивания обратно пропорционально r^{12} : $(1/r)^{12}$



*расстояние между атомами r_0
соответствует длине химической связи*

**Характерный вид потенциала Вандерваальсова взаимодействия
(формула Леннарда-Джонса) :**

$$U_{LD} = E_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \quad \text{или} \quad U_{LD} = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$$

где A и B — эмпирические константы

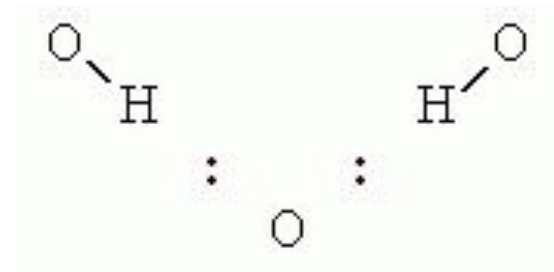
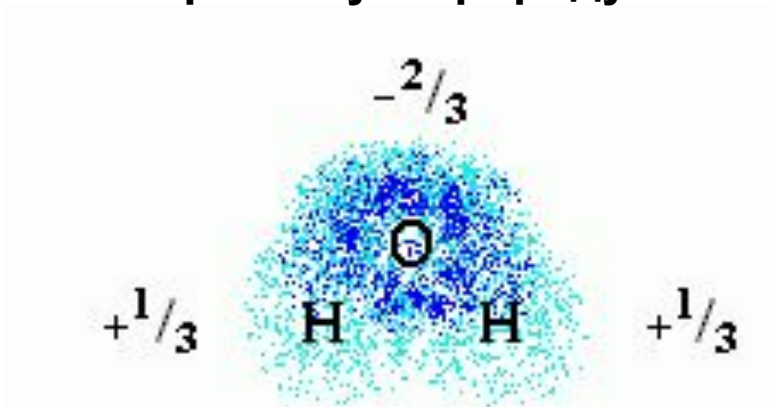
Характерные параметры потенциалов Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий

Взаимодействие	E_0 , ккал/моль	r_0 , Å	r_{\min} , Å
H H	0.12	2.4	2.0
H C	0.11	2.9	2.4
C C	0.12	3.4	3.0
O O	0.23	3.0	2.7
N N	0.20	3.1	2.7

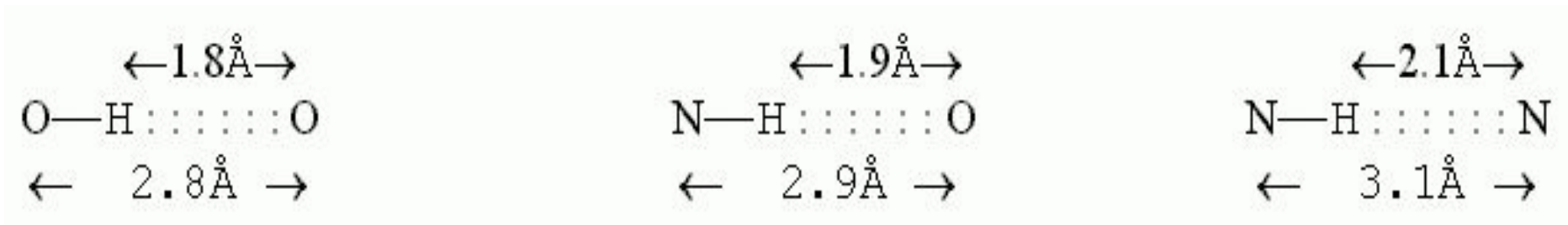


ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ

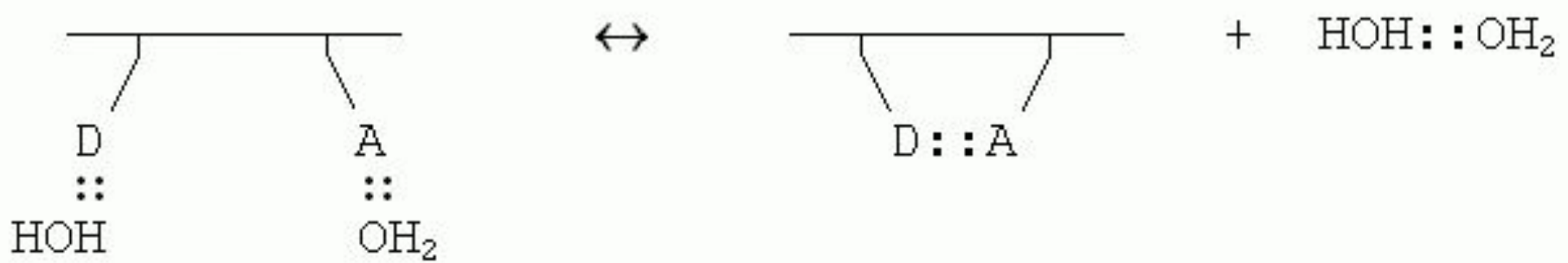
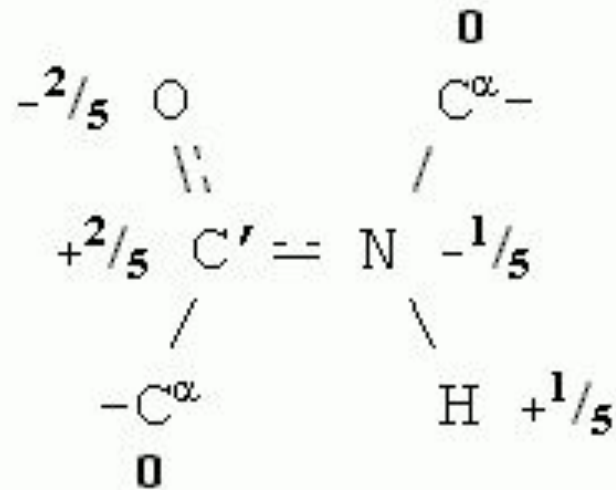
1) Водородная связь молекул воды носит электрическую природу.



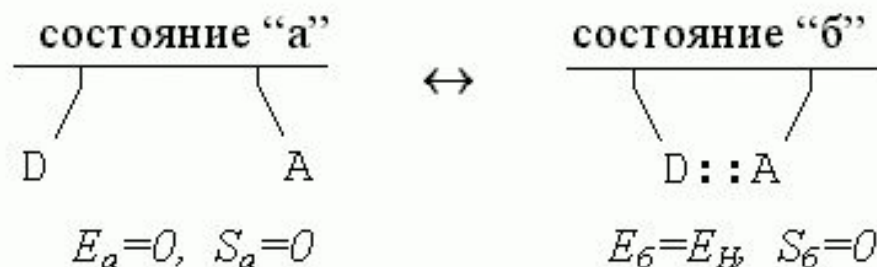
2) Донорно-акцепторный механизм взаимодействия



Взаимодействие белковой цепи с водой



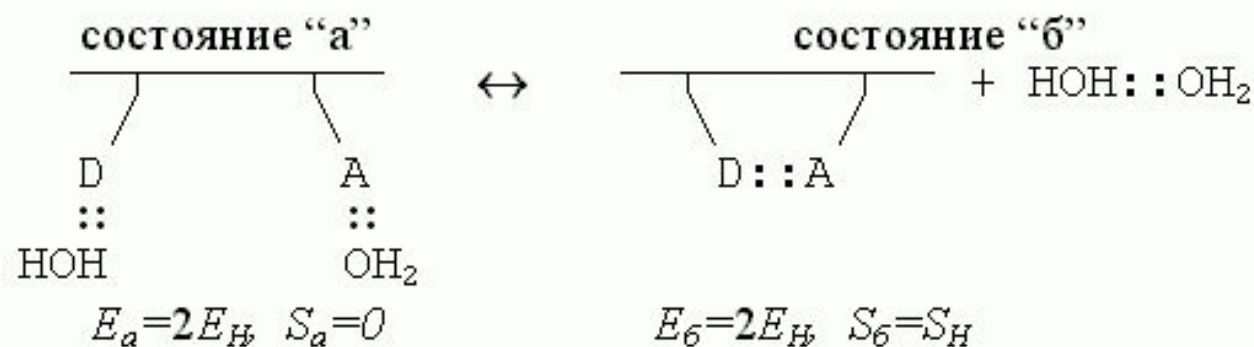
В вакууме:



$$E_б - E_a = E_H, \quad S_б - S_a = 0$$

$$F_б - F_a = (E_б - E_a) - T(S_б - S_a) = E_H$$

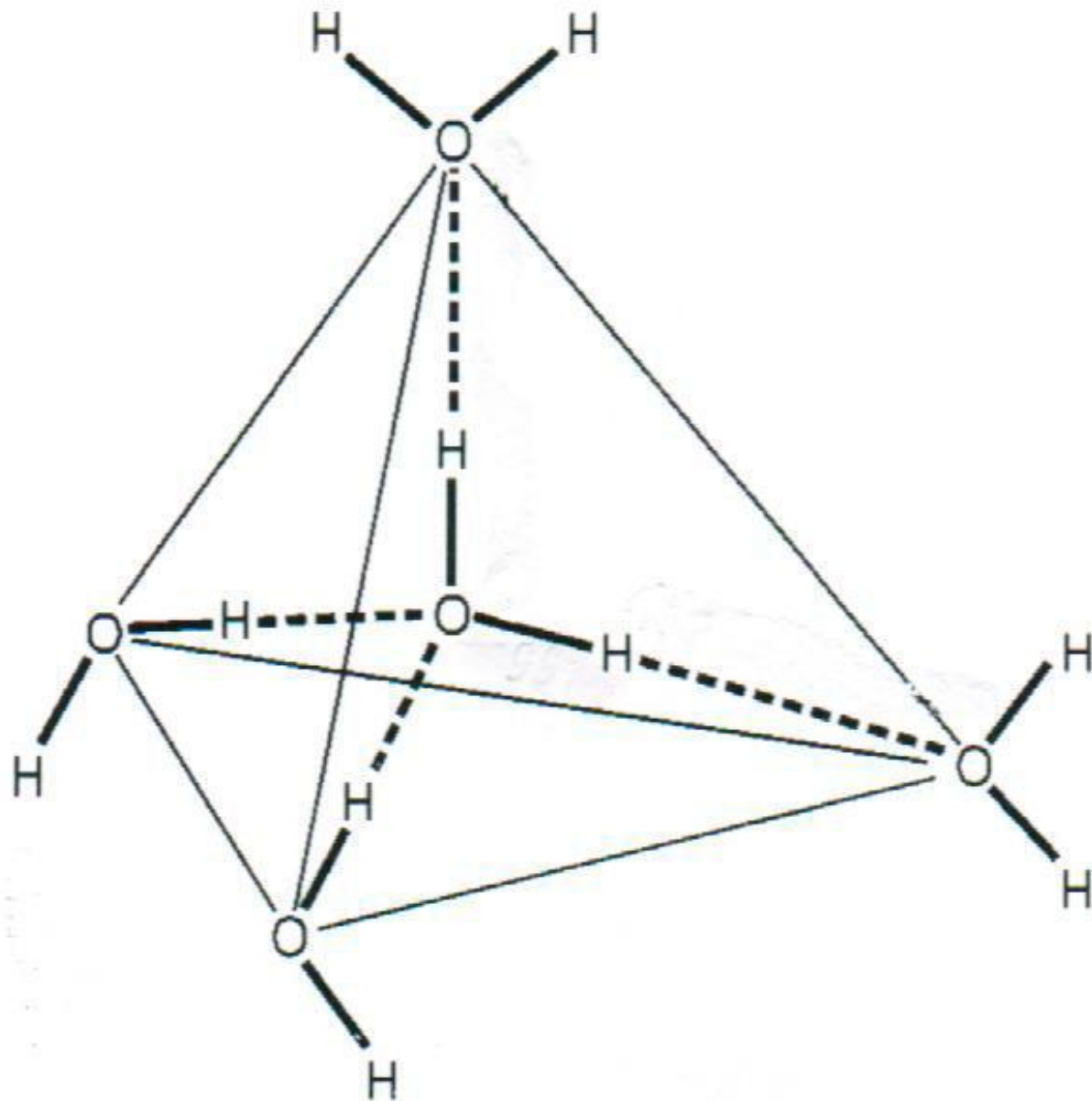
В воде:

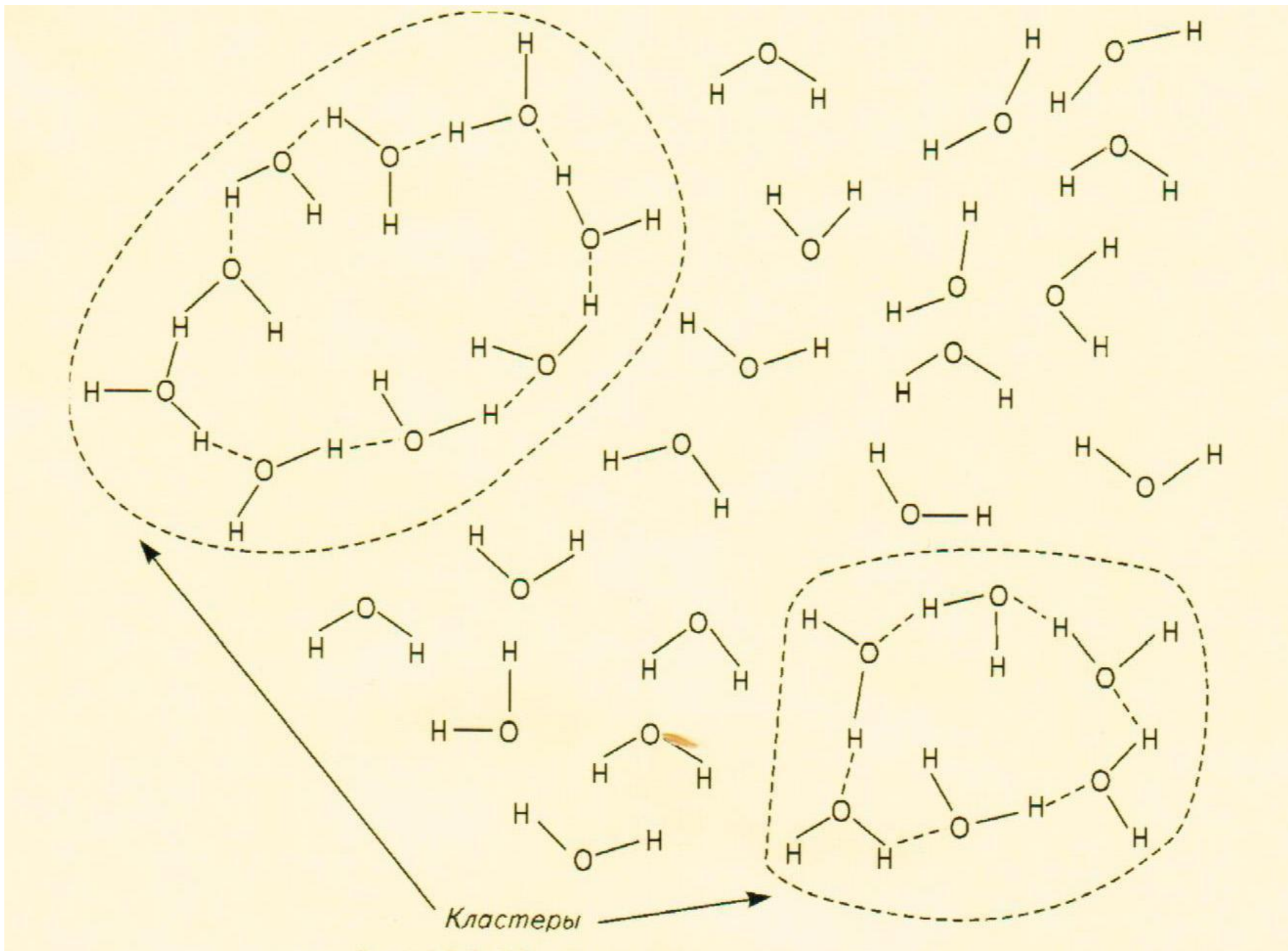


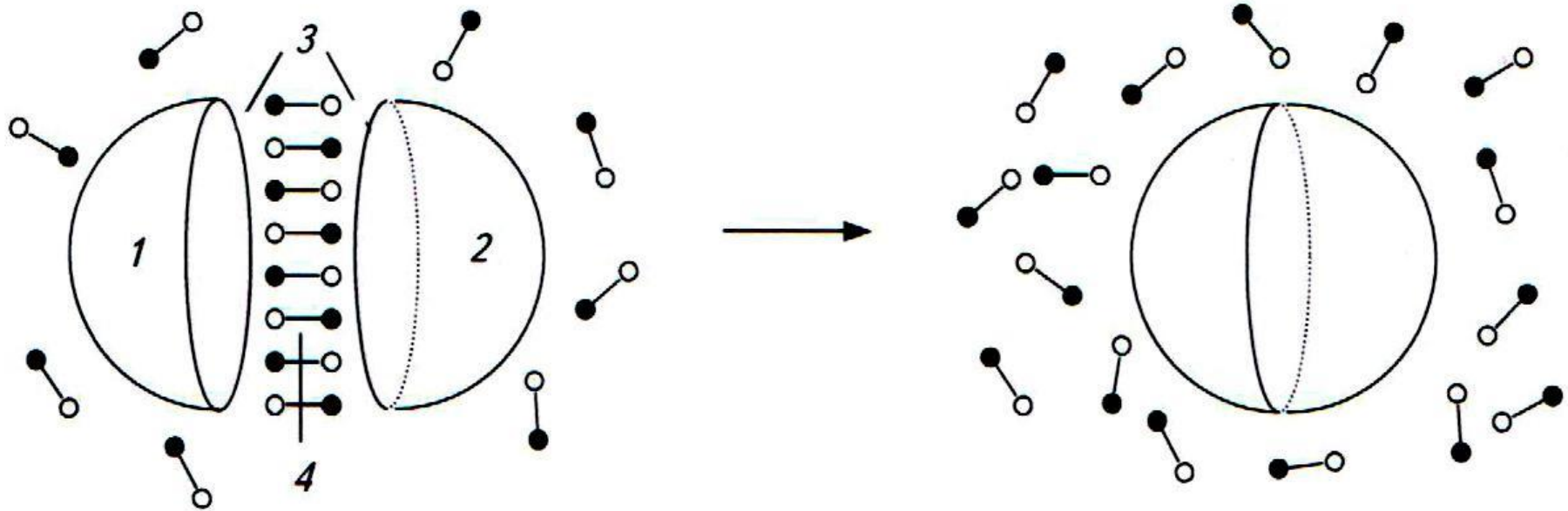
$$E_б - E_a = 0, \quad S_б - S_a = S_H$$

$$F_б - F_a = (E_б - E_a) - T(S_б - S_a) = -TS_H$$

ГИДРОФОБНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ







Схематическое изображение возникновения гидрофобных взаимодействий:

1, 2 — молекулы с неполярными областями; 3, 4 — упорядоченный участок воды

