

2-ДӘРІС

Тақырып:

Молекулааралық байланыстар. Электростатикалық өзара байланыстар. Сутектік байланыстар. Гидрофобтық әрекеттесулер

1. Дәрістің мақсаты

Бұл дәрістің негізгі мақсаты — молекулааралық әрекеттесулердің табиғатын, олардың физикалық-химиялық мәнін және заттардың қасиеттерін анықтаудағы рөлін түсіндіру. Студенттерге электростатикалық, сутектік және гидрофобтық өзара әрекеттесулердің теориялық негізін және олардың биологиялық, полимерлік және наноматериалдар жүйелеріндегі маңызын ашып көрсету.

2. Дәрістің міндеттері

- Молекулааралық байланыстардың түрлері мен энергиясын сипаттау;
- Электростатикалық және сутектік байланыстардың табиғи мысалдарын талдау;
- Гидрофобтық әрекеттесулердің физикалық механизмін түсіндіру;
- Әр түрлі әрекеттесулердің биополимерлер мен материалдардың қасиеттеріне әсерін көрсету.

3. Қол жеткізілетін оқу нәтижелері

Дәрісті меңгергеннен кейін студент:

1. Молекулааралық әрекеттесулердің негізгі түрлерін және олардың салыстырмалы энергияларын біледі;
2. Электростатикалық күштердің Кулон заңына бағынатынын түсіндіреді;
3. Сутектік байланыстардың бағытталған және селективті табиғатын сипаттай алады;
4. Гидрофобтық әрекеттесулердің термодинамикалық мәнін түсіндіреді;
5. Бұл әрекеттесулердің биологиялық және синтетикалық жүйелердегі рөлін талдай алады.

4. Дәріс мазмұны

4.1. Молекулааралық байланыстардың жалпы сипаттамасы

Молекулааралық байланыстар — бұл молекулалар немесе иондар арасындағы **әлсіз тартылыс күштері**, олар химиялық байланыстан әлсіз болғанымен, заттардың қасиеттеріне зор әсер етеді.

Мысалы:

- Судың қайнау температурасы H_2S -тен әлдеқайда жоғары — себебі суда сутектік байланыстар бар;
- Полимерлердің беріктігі мен тұтқырлығы макромолекулааралық әрекеттесуге тәуелді;
- Биомолекулалардың (ақуыз, ДНК) кеңістіктік құрылымы осы байланыстар арқылы тұрақтанады.

Молекулааралық байланыстардың негізгі түрлері:

1. Электростатикалық әрекеттесулер
2. Сутектік байланыстар
3. Ван-дер-Ваальс (индукциялық және дисперсиялық) күштері

4. Гидрофобтық әрекеттесулер

4.2. Электростатикалық өзара байланыстар

Электростатикалық әрекеттесулер зарядталған бөлшектер арасындағы **Кулон күштеріне** негізделеді.

Бұл әрекеттесулер ең күшті молекулааралық байланыстар қатарына жатады.

Кулон

заңы:

Электростатикалық әрекеттесулердің түрлері:

1. **Ион–иондық байланыс** – тұз кристалдарында байқалады (Na^+Cl^- , K^+Br^-).

Энергиясы 100–400 кДж/моль аралығында, бағытталмаған, берік байланыс.

2. **Ион–дипольдік әрекеттесу** – ион мен полярлы молекула арасында (мысалы, Na^+ және су молекуласы).

Бұл еріткіштің иондарды тұрақтандыру қабілетін түсіндіреді.

3. **Диполь–дипольдік әрекеттесу** – полярлы молекулалар арасындағы тартылыс (мысалы, $\text{HCl}-\text{HCl}$, $\text{CH}_3\text{CN}-\text{CH}_3\text{CN}$).

Энергиясы 5–25 кДж/моль.

Электростатикалық күштер **полярлық ортаның диэлектрлік тұрақтысына** кері пропорционал.

Сондықтан суда ($\epsilon = 80$) бұл күштер әлсірейді, ал бейполярлы еріткіштерде күшейеді.

Маңызы:

- Иондық және полярлы заттардың ерігіштігін анықтайды;
- Электролит ерітінділерінің тұрақтылығына әсер етеді;
- Полимерлердің зарядталған тізбектерінің өзара тартылысы (полиэлектролиттерде) электростатикалық табиғатты иеленеді.

4.3. Сутектік байланыстар

Сутектік байланыс – бұл сутек атомының электртерістілігі жоғары атоммен (O, N, F) әрекеттесуі нәтижесінде пайда болатын **ерекше бағытталған байланыс**.

Жалпы

түрі:

[
 $\text{D}-\text{H}\cdots\text{A}$
]

мұндағы D — донор атом (O, N), A — акцептор атом.

Энергиясы: 10–40 кДж/моль

Бұрышы: шамамен 180° , яғни бағытталған байланыс.

Арақашықтық: 0.18–0.30 нм.

Сутектік байланыстың екі түрі бар:

1. **Ішкімолекулалық** – бір молекула ішінде түзіледі (мысалы, орто-нитрофенолда).

2. **Сыртқы молекулалық** – әртүрлі молекулалар арасында (су, спирттер, аминдер).

Мысалдар:

- Су (H_2O): әр молекула 4 сутектік байланыс түзе алады → жоғары қайнау және балқу температурасы.
- Аммиак (NH_3): сутектік байланыстар аммиактың сұйық күйін тұрақтандырады.
- ДНҚ: қос тізбекті құрылым А–Т (2 байланыс), G–C (3 байланыс) жұптарымен ұсталады.

Маңызы:

- Ақуыздардың α -спираль және β -қабат құрылымдарын тұрақтандырады;
- Судың ерекше қасиеттерін (жоғары жылу сыйымдылығы, тұтқырлық) анықтайды;
- Полимерлердің кристалдық аймақтарының беріктігіне әсер етеді;
- Комплексті қосылыстар мен ассоциацияланған ерітінділер түзілуінде шешуші рөл атқарады.

4.4. Гидрофобтық әрекеттесулер

Гидрофобтық әрекеттесулер — бейполярлы молекулалардың немесе олардың бөліктерінің **су ортасында өзара тартылысы** нәтижесінде байқалатын құбылыс.

Бұл құбылыс **су молекулаларының торлы құрылымын сақтау ұмтылысына** негізделген.

Су молекулалары бейполярлы бөліктермен байланыса алмайды, сондықтан оларды сыртқа ығыстырып, бейполярлы бөліктерді біріктіреді.

Энергиясы: шамамен 4–8 кДж/моль, бірақ кооперативті түрде әсер еткенде жалпы әсері үлкен болуы мүмкін.

Мысалдар:

- Ақуыздардың өздігінен бүктелуі (гидрофобтық аминқышқыл қалдықтары ішке жиналады);
- Липидті қос қабаттардың түзілуі (мембраналар);
- Мицелла мен липосома құрылымдары (беткі активті заттарда).

Термодинамикалық

негізі:

Гидрофобтық әсер энтропиялық сипатта: су молекулаларының реттелу дәрежесі азайып, жүйенің жалпы энтропиясы өседі.

Маңызы:

- Биомембраналардың түзілуі мен тұрақтылығының негізгі механизмі;
- Нуклеопротеидтер мен ферменттердің қызметтік құрылымын анықтайды;
- Полимер–еріткіш жүйелеріндегі фазалық ажырау және гель түзілу процестеріне әсер етеді;
- Нанокұрылымды материалдар мен өздігінен жиналатын жүйелердің (self-assembly) негізі.

4.5. Ван-дер-Ваальс күштері (қосымша)

Молекулааралық әрекеттесулердің барлық түрлерінің негізінде Ван-дер-Ваальс күштері жатыр.

Олар дисперсиялық, индукциялық және ориентациялық компоненттерден тұрады.

Энергиясы 0.4–4 кДж/моль шамасында, бірақ көп молекула арасында олардың жиынтық әсері елеулі.

4.6. Молекулааралық әрекеттесулердің салыстырмалы сипаттамасы

Байланыс түрі	Энергиясы (кДж/моль)	Бағытталуы	Негізгі мысал	Маңызы
Ион–иондық	100–400	Бағытталмаған	NaCl	Тұз кристалдары
Ион–дипольдік	50–150	Бағытталған	$\text{Na}^+ - \text{H}_2\text{O}$	Ерітінділердің тұрақтылығы
Сутектік	10–40	Бағытталған	H_2O , NH_3 , ДНҚ	Биомолекулалар құрылымы
Гидрофобтық	4–8	Кооперативті	Ақуыз, липид	Биомембрана түзілуі
Ван-дер-Ваальс	0.4–4	Бағытталмаған	Инертті газдар	Барлық молекулаларда

4.7. Молекулааралық әрекеттесулердің қолданбалы маңызы

1. Биологияда:

- ДНҚ және РНҚ молекулаларының тұрақтылығы;
- Фермент–субстрат кешендерінің түзілуі;
- Клеткалық мембраналардың селективті өткізгіштігі.

2. Полимер химиясында:

- Макромолекулааралық байланыстардың күшеюі → материалдың беріктігі артады;
- Сутектік байланыстар арқылы полиамидтер мен полиуретандардың жоғары механикалық қасиеттері қалыптасады;
- Гидрофобтық әсер – латексті, коллоидты жүйелердің тұрақтылығын қамтамасыз етеді.

3. Материалтануда:

- Нанокұрылымды және биомиметикалық материалдарды жобалауда молекулааралық өзара әрекеттесулерді басқару шешуші рөл атқарады.

5. Қорытынды

Молекулааралық байланыстар — заттардың құрылымы мен қасиеттерін айқындайтын басты факторлардың бірі. Электростатикалық, сутектік және гидрофобтық әрекеттесулер әртүрлі физикалық табиғатқа ие болғанымен, олардың барлығы молекулалық жүйелердің тұрақтылығына және функционалдық қасиеттеріне әсер етеді.

- **Электростатикалық күштер** — ұзақ қашықтықтағы, күшті әрекеттесулер;
- **Сутектік байланыстар** — бағытталған, салыстырмалы түрде берік, биожүйелердің тұрақтылығының негізі;
- **Гидрофобтық әсерлер** — бейполярылы құрылымдардың су ортасында өздігінен ұйымдасуын қамтамасыз етеді.

Осы байланыстарды терең түсіну — химия, биофизика, материалтану және нанотехнология салаларында жаңа буын интеллектуалды материалдарды жобалау үшін теориялық негіз қалайды.

Қайталау сұрақтары:

1. Молекулааралық байланыс дегеніміз не?
Оның химиялық байланыстан негізгі айырмашылығы қандай?
2. Электростатикалық әрекеттесулер қандай бөлшектер арасында пайда болады?
Ион–ион, ион–диполь және диполь–диполь байланыстарының мысалдарын келтіріңіз.
3. Кулон заңы нені сипаттайды және электростатикалық күштің шамасы қандай факторларға тәуелді?
4. Сутектік байланыс қалай түзіледі және оның түзілу шарттары қандай?
Донор және акцептор атомдар дегеніміз не?
5. Сутектік байланыстың энергиясы мен бағытталуының ерекшеліктері қандай?
Ол коваленттік және Ван-дер-Ваальс байланыстарынан несімен ерекшеленеді?
6. Сутектік байланыстар табиғатта қандай мысалдарда кездеседі?
(мысалы: су, ДНҚ, ақуыздар, спирттер және т.б.)
7. Гидрофобтық әрекеттесулердің физикалық мәні қандай және ол не себепті пайда болады?
8. Гидрофобтық әрекеттесулердің биологиялық жүйелердегі маңызы қандай?
(мысалы: ақуыздың бүктелуі, мембраналар түзілуі, мицеллалар)
9. Молекулааралық әрекеттесулердің салыстырмалы энергиясын орналастырыңыз
(күштіден әлсізге қарай).
10. Молекулааралық әрекеттесулер полимерлер мен материалдардың қасиеттеріне қалай әсер етеді?
(ерігіштік, беріктік, тұтқырлық, құрылым тұрақтылығы)

6. Қолданылған әдебиеттер

1. Мун Г.А., Хуторянский В.В., Уркимбаева П.И. Макромолекулалық комплекстер жіне олар
2. Atkins P., de Paula J. *Physical Chemistry*. — Oxford University Press, 2020.
3. McMurry J. *Organic Chemistry*. — Cengage Learning, 2016.
4. Israelachvili J. *Intermolecular and Surface Forces*. — Academic Press, 2011.
5. Flory P. *Principles of Polymer Chemistry*. — Cornell University Press, 1953.
6. Doi M., Edwards S.F. *The Theory of Polymer Dynamics*. — Oxford University Press, 1986.
7. Berg, Tymoczko, Gatto. *Biochemistry*. — W.H. Freeman, 2019.
8. Каргин В.А. *Физическая химия полимеров*. — М.: Химия, 1985.
9. Флори П. *Принципы химии высокомолекулярных соединений*. — М.: Мир, 1972.