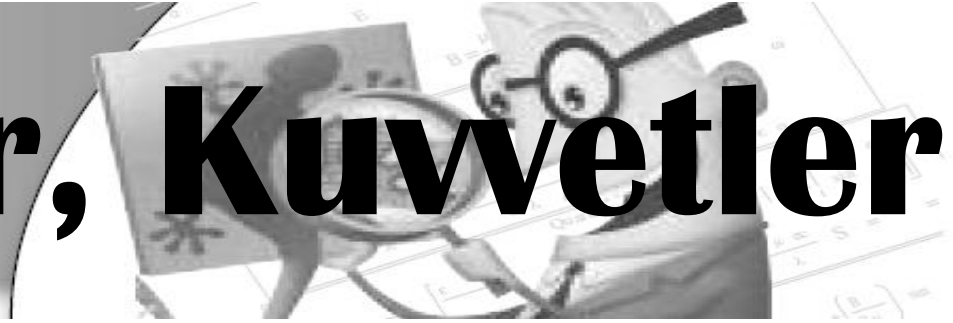
BİYOFİZİK



BÖLÜM 2| Bağlar, Kuvvetler



içindekiler

- Maddenin Yapısı
- Kuvvetler
- Kimyasal Bağlar
  - Kovalent Bağ
  - İyonik Bağ
  - Kimyasal Bağlarda ve Moleküler Konformasyonda Hareket
- Biyolojik Moleküllerde Konformasyonu Etkileyen Kuvvetler
- Coulomb (yük-yük) Kuvvetleri
- Dipol Kuvvetleri
  - Yük-Dipol Kuvvetleri
  - Dipol-Dipol Kuvvetleri
  - İndüklenmiş Dipoller
- Hidrojen Bağı
- Dispersiyon Kuvvetleri

Maddenin Yapısı



Gördüğümüz, dokunduğumuz, tattığımız veya kokladığımız her şey bir veya daha fazla malzemeden oluşur.

Evrendeki tüm maddeler çok küçük parçacıklardan yapılmıştır. Sürekli hareket halindedirler ve birbirleriyle sürekli etkileşim halindedirler.

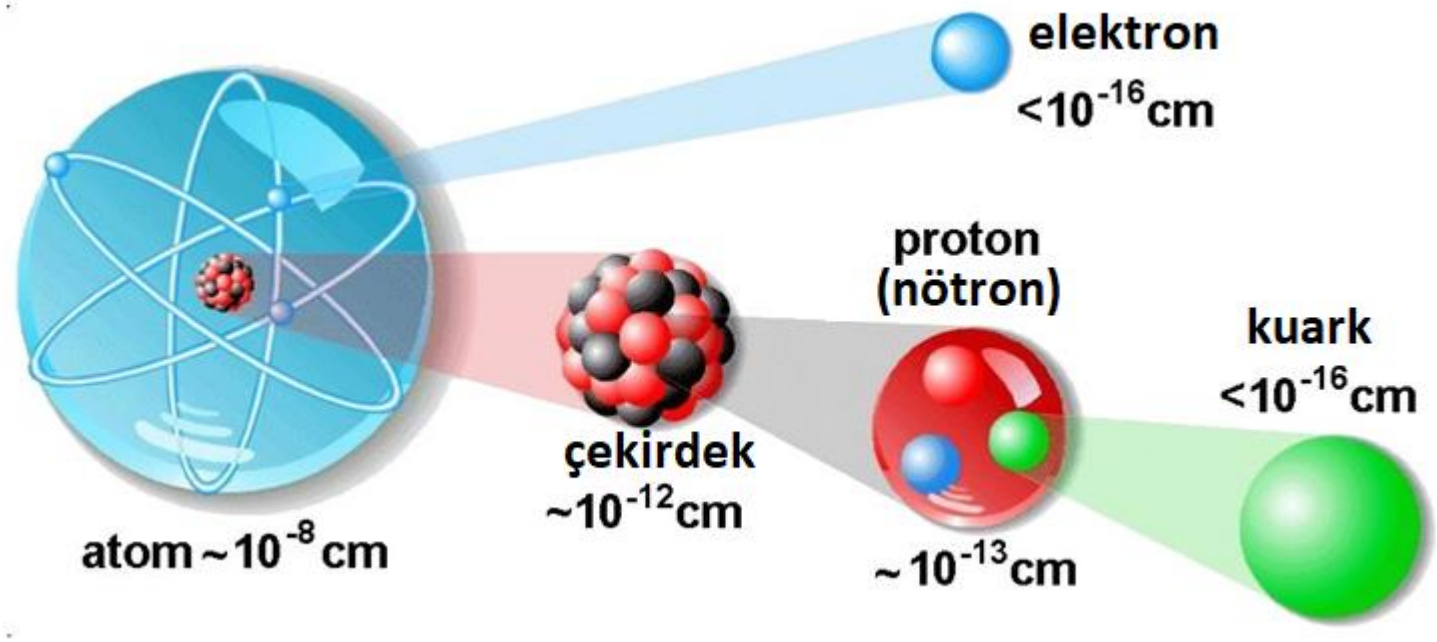
Temel parçacıklar atomları, atomlar molekülleri oluşturur. Evrende, periyodik tablodaki elementler olan sınırlı sayıda atom türü vardır.

Atomlar ve moleküller, kimyasal reaksiyonlarla yeni bağlar oluşturur. Karbona dayalı moleküller yaşam için temeldir ve bunlara organik moleküller denir.

Maddenin Yapısı



Atom, elementin kendi kimyasal özelliklerini taşıyan en küçük parçası olarak tanımlanabilir. Çekirdek p, n ve em kuvvetle çekirdeğe bağlı elektron veya elektronlardan oluşur. İyon, elektrik yüklü atomdur.



Maddenin Yapısı



Molekül, iki veya daha fazla atomun yeni bir yapı oluşturmak üzere bir araya gelmesi sonucu oluşan yeni parçacık olarak isimlendirilir. Maddenin serbest halde bulunabilen ve kimyasal özelliklerini taşıyan en küçük parçası molekül'dür. Bileşiğin en küçük atomlar grubu.

Katı, birbirine bağlı birçok moleküldeн oluşur. Katı, moleküllerin (veya çoğu zaman atomların) düzenli yapılarının tekrarlanması ile oluşmuş ise kristal olarak adlandırılır.

Madde çok sayıda atom, molekül veya iyonlardan oluşur. Maddenin fiziksel hali katı, sıvı veya gaz olabilir. Kütlesi, hacmi ve madde miktarı ile belirlenir.

Maddenin Yapısı



Kimyasal bileşikler, moleküllerden oluşurlar: Onlar belli oranlarda birden fazla kimyasal elementin birleşmesiyle oluşurlar. Her molekül, birbirine bağlı atomlar (en az iki atom) grubudur.

Kimyasal elementler, atomlardan meydan gelmiş tek atomlu maddelerdir. Tek atomlu (monoatomic) maddelerde (mesela demir) atom ve molekül fonksiyonel olarak aynı şeylerdir. Yani bir kimyasal elementin molekülleri onun kendi atomlarıdır.

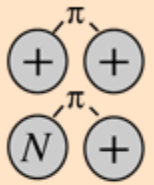
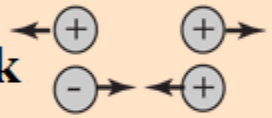
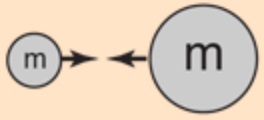
Doğadaki Kuvvetler



Doğada dört temel kuvvet vardır. Bunlar;

- Cisimler arasındaki *kütleçekim kuvvetleri*,
- Elektrik yükleri arasındaki *elektromanyetik kuvvetler*,
- Atom altı parçacıklar arasındaki *güçlü nükleer kuvvetler* ve
- Belirli radyoaktif bozunma süreçlerinde ortaya çıkan *zayıf nükleer kuvvetler*.

Temel kuvvetler

		Şiddet	Menzil (m)	Parçacık
Güçlü		1	10^{-15} (orta büyüklükte bir çekirdeğin çapı)	gluonlar, π (nükleonlar)
Elektro-manyetik		$\frac{1}{137}$	Sonsuz	foton kütle = 0 spin = 1
Zayıf		10^{-6}	10^{-18} (bir protonun çapının % 0,1)	bozonlar W^+, W^-, Z_0 kütle> 80 GeV spin = 1
Gravi-tasyonel		6×10^{-39}	Sonsuz	graviton? kütle = 0 spin =2

Doğadaki Kuvvetler



Moleküller arası kuvvetin kaynağı

- Yerçekimi mi?

  Hayır, 10^{-52} J mertebesindedir ve çok önemsizdir.
- Güçlü kuvvet?

  Hayır, 10^{-6} nm aralığında önemli, ancak moleküler boyutlar tipik olarak 5×10^{-1} nm'dir.
- Zayıf kuvvet?

  Hayır, 10^{-9} nm aralığında önemli, sadece nükleer parçacıklar arasındaki kuvvetler.
- Elektromanyetik?

  Evet, yüklü parçacıklar olduklarından, uzun menzilde çekici ve kısa menzilde itici olduklarından.

Kimyasal Bağlar



Moleküller birbirine bağlı atomlardır. Moleküllerde atomları birbirine bağlayan bağlara *kimyasal bağlar* denir. Bağlar, atomdan moleküllerin ve moleküllerden ise canlı sistemlerin oluşmasında en belirleyici rolü oynar. Bir molekül içindeki atomların *konumunu* ve *konformasyonunu (şeklini)* etkileyen birçok *bağ* ve *kuvv*et vardır.

Kimyasal bağ, her zaman atomların bir veya daha fazla dış elektronunu içerir.
Kimyasal bağa katılan bu *en dıştaki elektronlara değerlik elektronları* denir.

İki tür kimyasal vardır;

- ✓ *Kovalent bağlar*
- ✓ *İyonik bağlar*

Kimyasal Bağlar



Kovalent Bağlar

Her atomdan bir veya daha fazla değerlik elektronu (en dıştaki elektron bulutu) iki atom arasında paylaşıldığında oluşur.

Bir atomda, negatif yüklü elektron bulutu ile pozitif yüklü çekirdek arasında *her zaman çekici bir kuvvet* vardır.

Bu bağlarda değerlik elektronları atomlar arasında paylaşılır (paylaşılan her elektron çifti için her atomdan bir tane). Kovalent bağlar, iki atom arasında oluşan *en güçlü bağlardır*.

Kimyasal Bağlar



Kovalent Bağlar-devam

Pratikte, kovalent bir bağdaki elektronlar her iki atom tarafından eşit olarak paylaşılmayabilir. Atomlardan biri, elektronları diğerinden daha güçlü çekebilir. Bunun nedeni,

- bir atomun daha pozitif yüklü bir çekirdeğe sahip olması
- çekirdeğinin paylaşılan elektronlara daha fazla maruz kalması veya daha yakın olması olabilir.

Böylece, paylaşılan elektron bulutu, daha güçlü çeken atoma yaklaşır ve bu atoma biraz negatif yük verir. Diğer atomun biraz pozitif yükü olacaktır. Bu durumda, ***kovalent bağın polar olduğu*** söylenir, bu da elektrik yükünün bağ boyunca eşit olarak dağılmadığı anlamına gelir.

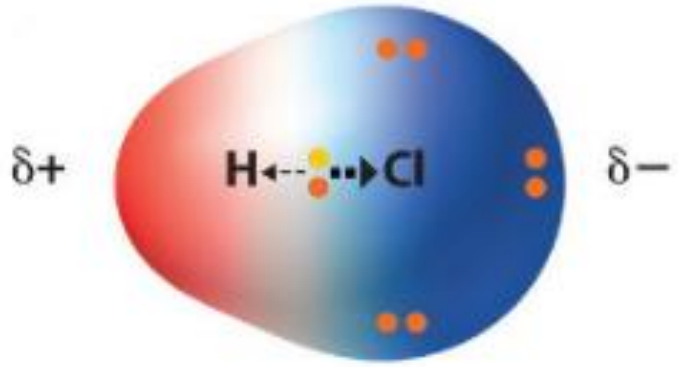
Kimyasal Bağlar



Kovalent Bağlar-devam



Polar olmayan (*nonpolar) kovalent bağ*. Elektronlar eşit paylaşılıyor. Atomlar üzerinde yük yok. (H-H, Cl-Cl)



Polar kovalent bağ. Elektronlar bağlı atomlar arasında eşit <u>paylaşılmaz</u>. Atomlar kısmi yüklere sahip (H-Cl, H_2O)

Kimyasal Bağlar



İyonik Bağlar

Bir veya daha fazla değerlik elektronu bir atomdan tamamen soyulduğunda ve komşu atoma "bağışlandığında" oluşur.
Polar bağda, atomlardan biri diğer atomun elektronlarını güçlü bir şekilde çekebilir ve elektron "daha zayıf" atomdan tamamen sıyrılır. Bu "kayıp" elektron, paylaşılmaz, yalnızca güçlü çekimli atomun yörüngesinde döner. Sonuçta, *her atom bir iyon haline gelir.*

Elektron kaybeden atom pozitif iyon olur. Elektron kazanan atom ise negatif iyon olur. *İki atomu bir arada tutan kuvvet* artık çekirdeklerin paylaşılan elektronlara çekilmesi değil, *pozitif ve negatif yüklü iyonlar arasındaki elektrostatik çekimden kaynaklanır*.

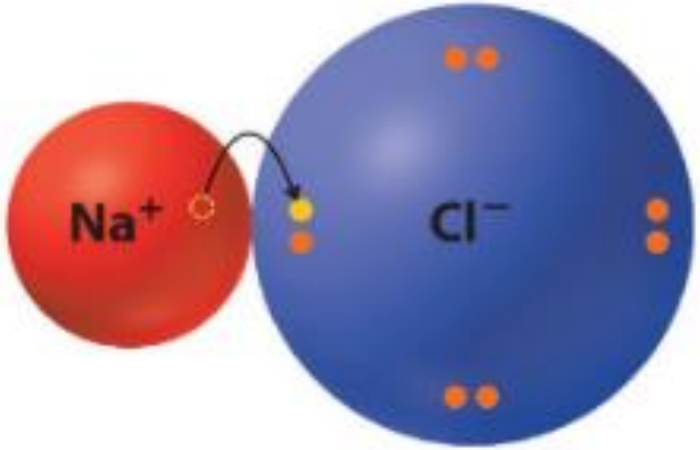
Kimyasal Bağlar



İyonik Bağlar-devam

İyonik bağlar en çok kristal katılarda yaygındır. Ancak sıvı solüsyonlarda (hücre içindeki gibi) iyonlar serbestçe yüzer. Her iyon etrafta dolaşan komşu iyonlardan gelen rastgele çekici ve itici kuvvetlerle karşılaşır.

Bu, moleküllerin termal (kinetik) enerjisinden kaynaklanmaktadır.



İyonik bağda elektron tamamen bir atomdan diğerine aktarılır. Tüm yükler meydana gelen iyonlar üzerindedir.

Kimyasal Bağlar



İyonik Bağlar-devam

Çözelti içindeki iyonların biyomoleküllerin belirli iyonize bölgelerine bağlandığı durumlar vardır.

Bir örnek, DNA çift sarmalının omurgasındaki negatif fosfat gruplarına (PO_4 –) bağlanan sodyum (Na +) iyonları durumudur. Sodyum iyonları, DNA omurgası boyunca negatif yüklü fosfat grupları arasındaki itme kuvvetini azaltarak çift sarmal yapının stabilize edilmesine yardımcı olur.

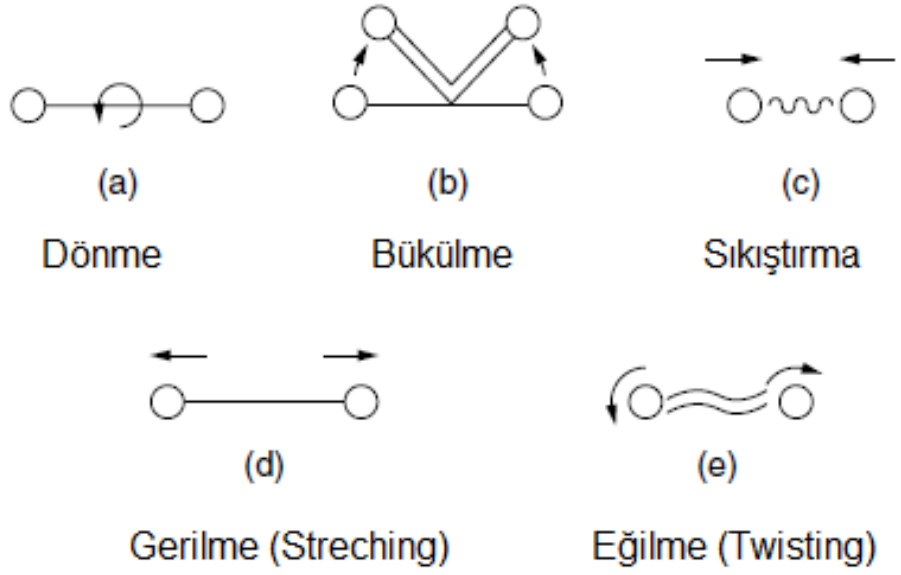
Kimyasal Bağlarda Hareket



Kovalent bağlar tipik olarak çeşitli miktarlarda esnekliğe sahiptir. Bu esneklik, belirli bağa bağlı olarak,

- serbest dönüş (aks üzerindeki bir tekerlek gibi)
- bükülme,
- sıkıştırma,
- gerilme (streching)ve
- Eğilme (twisting)

gibi yay benzeri hareketler gibi hareketlere izin verebilir.



b,c,d ve e yay benzeri hareketlerdir. Harekete karşı çıkan ve atomları orijinal konumlarına geri döndürmeye çalışan kuvvet geri çağırıcı kuvvetle olur.

Biyomoleküllerde Kuvvetler



Biyomoleküllerde konformasyonu etkileyen *tüm kuvvetler*, *elektrikseldir*, yani yükler arasındaki çekme veya itmelerden kaynaklanırlar.

Kovalent ve iyonik bağlar dışındaki moleküler kuvvetler *van der Waals* kuvvetleridir. Van der Waals kuvvetlerinin, kovalent ve kristalin iyonik bağ olmayan tüm moleküler kuvvetleri kapsadığına dikkate alacağız.

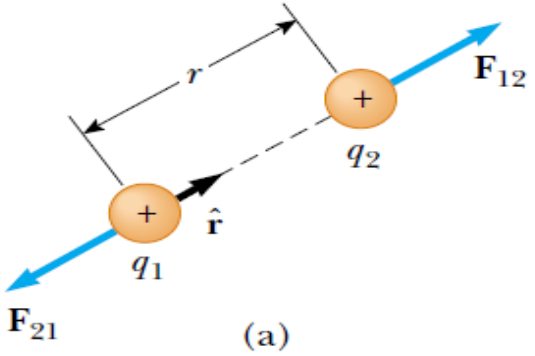
Biyomoleküllerde Kuvvetler

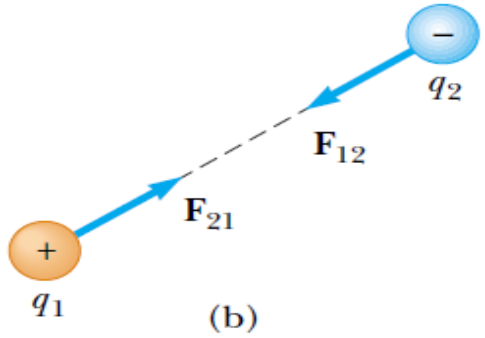


Yük-Yük Kuvvetleri

Elektrostatik yükler arasındaki kuvvet Coulomb kanunu ile verilir.

$$F = k\frac{|q_1 q_2|}{r^2}$$





r: iki yük arsındaki uzaklık q_1 ve q_2: yükler

$k=1/(4\pi\varepsilon_0)$: Coulomb sabiti, $k \approx 8{,}98\times10^9\ Nm^2/C^2$

ε_0: boş uzayın elektrik geçirgenliği,

$\varepsilon_0 \approx 8{,}85\times10^{-12}\ C^2/Nm^2$, $e = 1{,}602\times10^{-19}\ C$, $1\mu C = 10^{-6}\ C$

Biyomoleküllerde Kuvvetler



Yük-Yük Kuvvetleri -devam

Biyofizikte, moleküler kuvvetlerden kaynaklanan potansiyel enerji ile ilgileniriz. Bu potansiyel enerji molekülün *Gibbs enerjisine* katkı sağlar. Moleküler konformasyonu etkileyen potansiyel enerjiyi hesaplayabilirsek, o zaman Gibbs enerjisini en çok azaltan en olası konformasyonu belirleyebiliriz.

Gibbs (serbest) enerjisi entalpiden, entropi ve mutlak sıcaklığın çarpımının çıkarılmasıyla elde edilen termodinamik bir değişkendir. Genel olarak kimyasal bir reaksiyonun enerji potansiyelinin işe dönüştürülebilmesiyle ilgilidir.

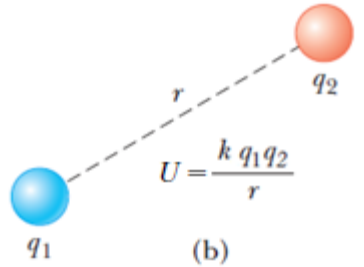
Biyomoleküllerde Kuvvetler



Yük-Yük Kuvvetleri -devam

Potansiyel enerji iş yapma yeteneği olduğundan ve iş kuvvet çarpı uzaklık olduğundan, kuvvetin her iki tarafını yükler arasındaki mesafeyle çarparak

$$U = k\frac{q_1 q_2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_1 q_2}{r} = \frac{q_1 q_2}{\varepsilon r}$$



potansiyel enerji buluruz. ε: geçirgenlik olarak adlandırılır ve bir ortamın elektrik alanı ile ne kadar kolay ***polarize edildiğinin bir ölçüsüdür***. ε aynı zamanda ortamın ***dielektrik sabiti*** olarak da adlandırılır.

Biyomoleküllerde Kuvvetler



Yük-Yük Kuvvetleri -devam

20 ° C veya oda sıcaklığında C^2/Nm^2

vakumun geçirgenliğini → 1
havanın geçirgenliği → 1.000585 'tir ve
kağıdın geçirgenliği ≈ 3 'tür.
hücre zarını oluşturan lipidlerin geçirgenliği yaklaşık 2
suyun geçirgenliği yaklaşık 80 'dir.

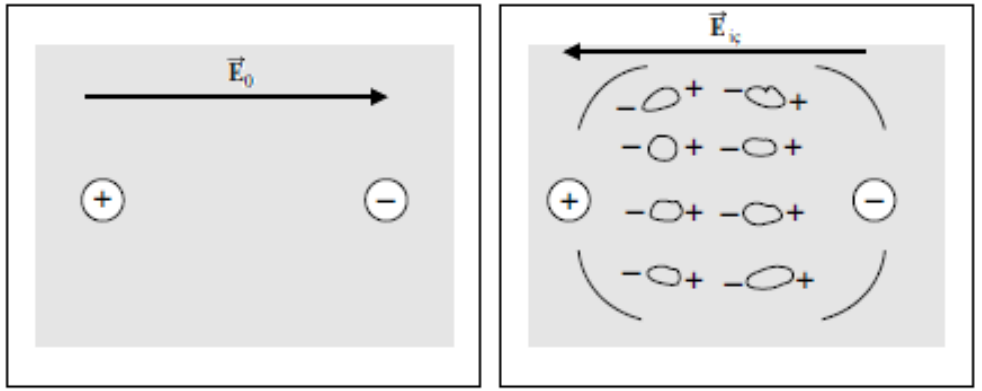
Bu, suyun olağanüstü elektrik iletme yeteneğini yansıtır.

Biyomoleküllerde Kuvvetler



Yük-Yük Kuvvetleri -devam

Potansiyel enerji denkleminden ε arttıkça U'nun ve F'nin azalacağını görebiliriz. Bunun sebebi içine yerleştirilen bir yükle kolayca polarize edilen bir ortamın, yükten kaynaklanan kuvvete karşı çıkacak şekilde kendi polaritesini yönlendirmesidir.



Vakumda yük — Su gibi polar bir ortamda yükler

Bir vakumda ve yüksek geçirgenliğe sahip bir ortamda pozitif ve negatif bir yük. Yüksek geçirgenliğe sahip ortamın (örneğin, su) nötr, ancak kutupsal molekülleri, negatif uçları pozitif yüke ve pozitif uçları negatif yüke bakacak şekilde kendilerini yönlendirir. Polar moleküllerin bu yönelimi, ortamdaki pozitif ve negatif yükün elektrik alanlarına karşı koyan küçük elektrik alanları yaratır. Bu, pozitif ve negatif yük arasındaki kuvveti ve potansiyel enerjiyi etkili bir şekilde azaltır.

Biyomoleküllerde Kuvvetler



Dipol Kuvvetleri

Bir ***elektrik dipolü***, belirli aralıklı iki eşit ve zıt yük olarak tanımlanır. Birçok nötr molekülde, yük molekül içinde eşit olarak dağılmaz. Bu, elektron bulutlarının eşit olmayan dağılımından veya molekülün farklı parçalarının farklı şekilde iyonize olmasından da kaynaklanabilir.

Her iki durumda da bir **molekülün** (veya bir molekülün bir kısmının) **davranışı, onu bir elektrik dipolü olarak ele alarak** çok **kolay bir şekilde tahmin edilebilir.**

Biyomoleküllerde Kuvvetler

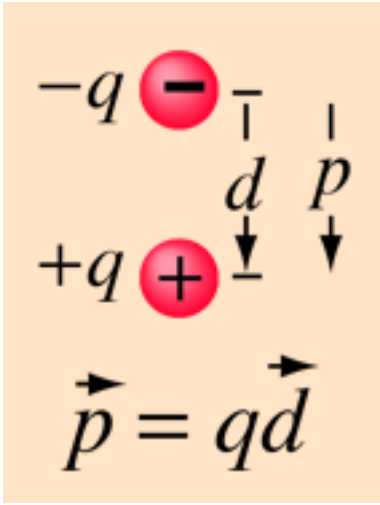


Dipol Kuvvetleri - devam

Yük miktarı Bir iyonu onun yük miktarı ile karakterize ederiz. Bir dipolü de karakterize etmenin bir yolu da dipol momenti adı verilen bir miktardır. Dipol moment, dipolün bir ucundaki yükün büyüklüğü ile iki yük arasındaki mesafenin çarpımına eşittir.

$$\vec{p} = q\vec{d}$$

Dipol kuvvetleri içeren birkaç etkileşimi inceleyeceğiz.



- Yük- dipol kuvvetleri
- Dipol- dipol kuvvetleri
- İndüklenmiş Dipoller

Biyomoleküllerde Kuvvetler

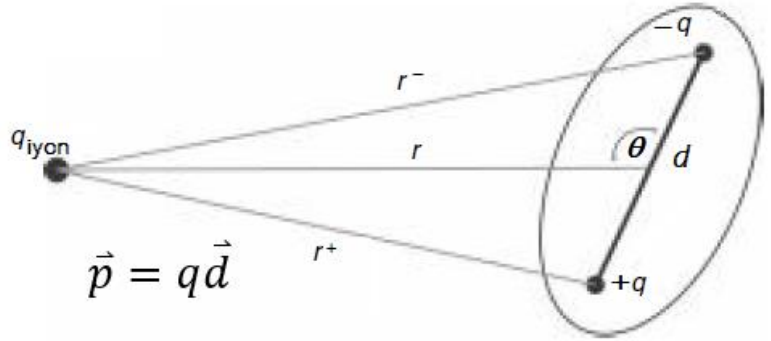


Yük (iyon)- Dipol Kuvvetleri

Nötr fakat polar bir molekülümüz olsun. Bir iyon veya bir nokta yükle bu molekülün etkileşme potansiyeli, r^- ve r^+ yı yaklaşık r alırsak yani $r^+ = r + (1/2)\, d \cos\theta$ alırsak dipol ve yük arasındaki potansiyel enerjiyi

$$p = qd \quad \text{ve} \quad U = U_{iyon,q} + U_{iyon,-q} = \frac{q_{iyon}q}{\varepsilon r^+} - \frac{q_{iyon}q}{\varepsilon r^-}$$

$$\Rightarrow U = \frac{-qpcos\theta}{\varepsilon r^2}$$

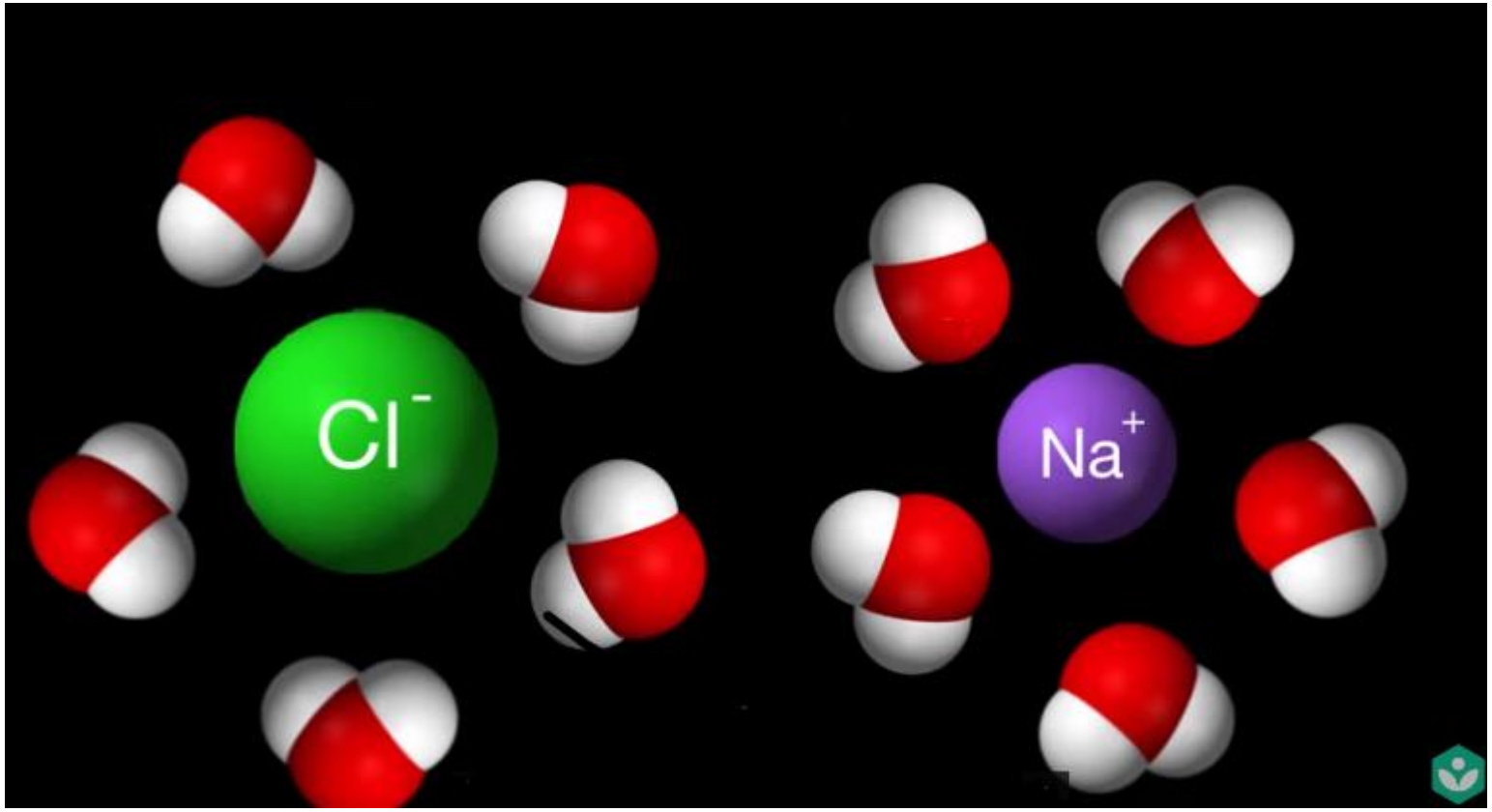


yazabiliriz.

Biyomoleküllerde Kuvvetler



Yük (iyon)- Dipol Kuvvetleri



Tuzlu (NaCl) su (H_2O)

Biyomoleküllerde Kuvvetler



Dipol- Dipol Kuvvetleri

- *İki dipol* etkileşime girdiğinde etkileşen *toplam dört yüke* sahibiz.
- *İki dipol* etkileştiğinde her bir dipol için dikkate alınması gereken *iki farklı* açı vardır.

İki dipol arasındaki potansiyel enerji;

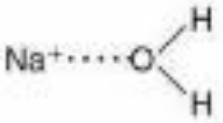
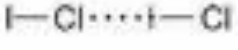
$$U = \frac{-p_1 p_2 F}{\varepsilon r^3}$$

F potansiyel enerji fonksiyonu.

Biyomoleküllerde Kuvvetler



İndüklenmiş Dipoller

Kuvvet	Model	Etkileşmenin Temeli	Enerji (kJ/mol)	Örnek
İyon- dipol		İyon yük- dipol yük	40-600	
Dipol-dipol		Dipol yükler	5-25	
İyon- İndüklenmiş dipol		İyon yük- e bulutu	3-15	
Dipol-indüklenmiş dipol		Dipol yük- e bulutu	2-10	

Biyomoleküllerde Kuvvetler



İndüklenmiş Dipoller

Nötr, polar olmayan bir molekülün elektron bulutu, bir elektrik alanı (yakınındaki iyon veya dipolün mey. getirdiği) varlığında bozulabilir, böylece molekül polar hale gelir. Buna ***indüklenmiş dipol*** denir.

Molekülün polar kalitesini indükleyen elektrik alanı tipik olarak yakındaki bir iyon veya dipolden gelir. Molekülün elektron bulutundaki bozulmanın ölçüsü ***kutuplanabilirlik*** (α) olarak tanımlanır. α indüklenmiş dipol momentin elektrik alan büyüklüğüne oranıdır.

$$\alpha = \frac{p}{E} \text{ ve } p = \alpha E, \quad E = \frac{q}{\varepsilon r^2} \Rightarrow p = \frac{\alpha q}{\varepsilon r^2}$$

İndüklenmiş dipolle bir yükün etkileşme potansiyeli

$$U = \frac{-\alpha q^2}{\varepsilon r^4}$$

elde edilir.

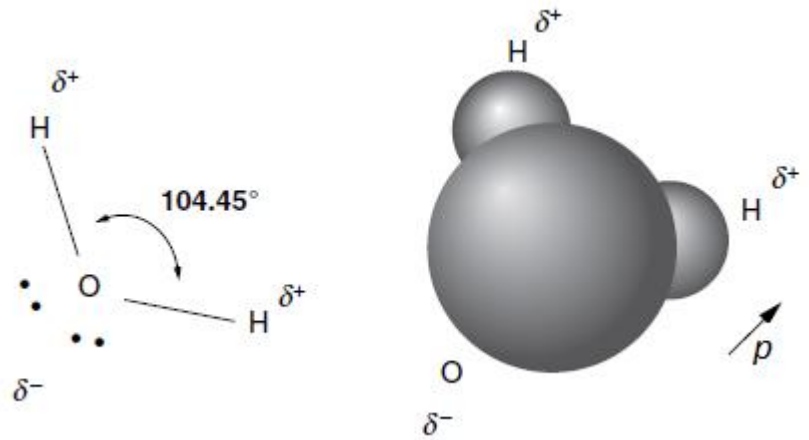
Biyomoleküllerde Kuvvetler



Hidrojen Bağları ve Su

Su inanılmaz bir moleküldür ve susuz hayat olamaz. Su oldukça kutuplu bir moleküldür. Su molekülü, her iki ucunda pozitif ve ortada negatif yük olan V harfine benzer bir moleküldür.

Su sürekli dipoldür. Bazen bir su molekülünün her "ayağına" bir dipol muamelesi yaparız, çünkü tipik olarak su molekülünün yalnızca bir tarafı (bir seferde) diğer yükler veya dipollerle etkileşime girer.



Suyun kalıcı çift kutuplu yapısı, su moleküllerinin birbirini çekmesine ve düzenli bir şekilde dizilmesine neden olur.

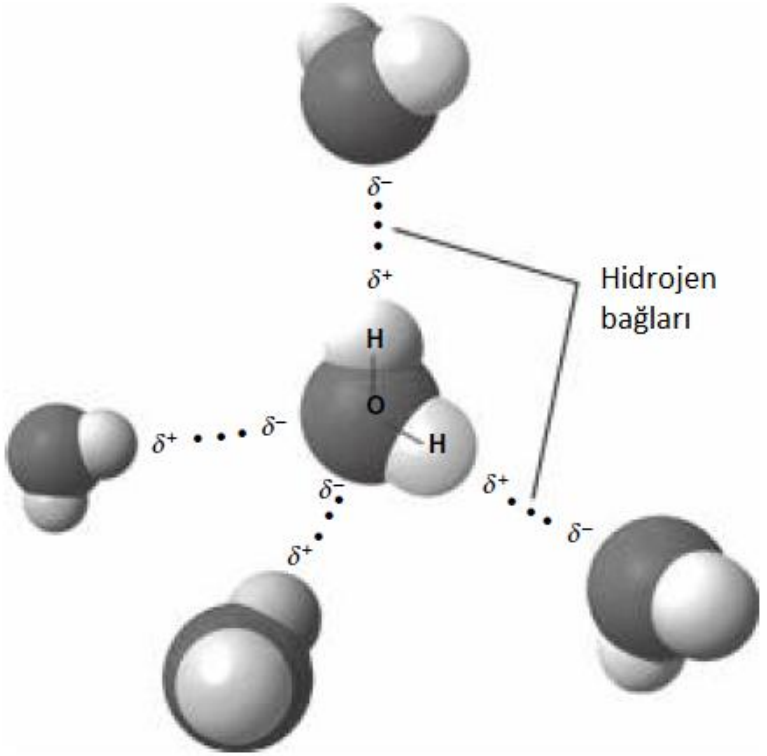
Biyomoleküllerde Kuvvetler



Hidrojen Bağları ve Su

Bir su molekülünün pozitif hidrojen atomu, şekildeki gibi komşu su molekülünün negatif oksijen atomu yönünde yönlendirilir. Bir su molekülü üzerindeki pozitif yüklü hidrojen atomu ile diğer moleküldeki negatif yüklü oksijen atomu arasındaki çekici kuvvete ***hidrojen bağı*** denir.

Bu bağlar potansiyel enerjiye sahiptir. Bu şekilde yönlendirildiğinde, çift kutuplar birbirine yönelme eğiliminde olduğundan, etkileşim etkili bir şekilde bir yük-yük etkileşimidir.



Suda hidrojen bağı

Biyomoleküllerde Kuvvetler



Genel Olarak Hidrojen Bağları

Hidrojen bağlayabilen tek molekül su değildir. Bir moleküldeki bir hidrojen atomu pozitif bir yüke sahip olduğundan, başka bir molekülde negatif bir yükle etkileşime girebilir. Bir hidrojen bağının ***tek bir hidrojen atomu veya bir hidrojen molekülü*** ile etkileşim ***olmadığına*** dikkat edin.

Bir atomun elektronlar üzerindeki çekme miktarını tanımlayan fiziksel özelliğe ***elektronegatiflik*** denir. Biyomoleküllerde, en yaygın elektronegatif atomlar, azot ve oksijendir..

Biyomoleküllerde Kuvvetler



Dispersiyon Kuvvetleri

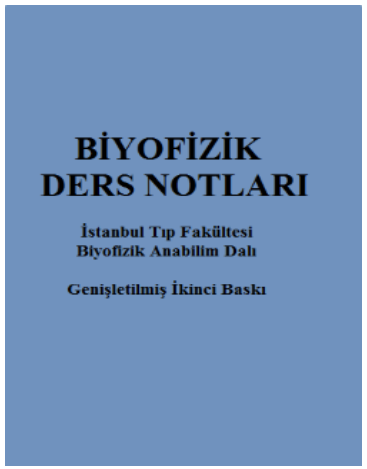
Tüm elektron bulutları hızla dalgalanır ve birçok molekülde bu anlık dipol momentlerine yol açar. Bu tür iki molekül birbirine yaklaştığında, dalgalanan dipol momentleri çekici veya itici kuvvetlere yol açabilir. Bu kuvvetler, dalgalanmaların hızı veya frekansı her iki molekülde de aynı ise (senkronize ise) önemli olabilir. Eşzamanlı dalgalanan yük dağılımlarından kaynaklanan kuvvetler, ***dispersiyon (dağılım) kuvvetleri*** olarak adlandırılır. Dispersiyon kuvvetlerine eşlik eden enerji, mesafenin 6. kuvveti ile ters orantılıdır, yani

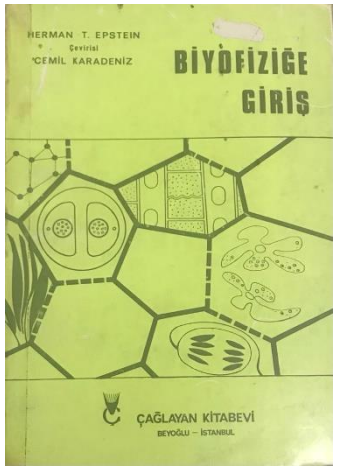
$$U \propto \frac{1}{r^6}$$

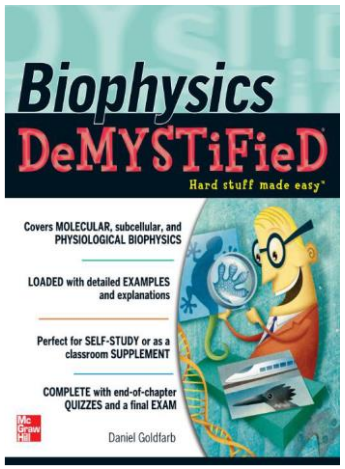
şeklinde değişir. Bu nedenle ***nispeten kısa mesafeli bir etkileşimdir***.

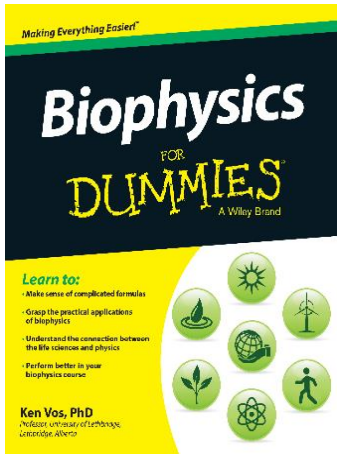
Kaynaklar

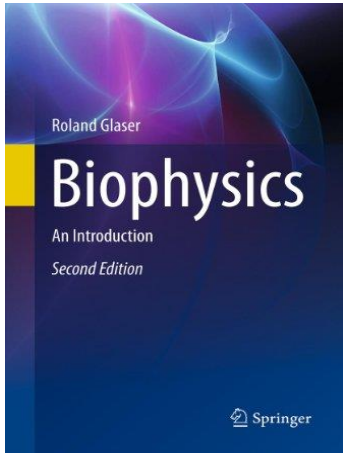


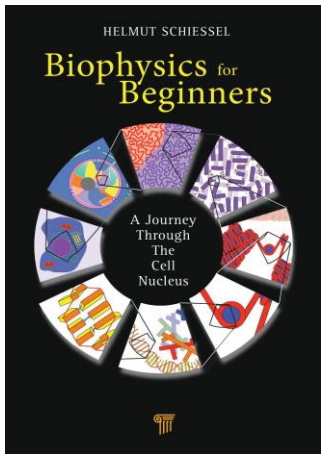

BİYOFİZİK
DERS NOTLARI
İstanbul Tıp Fakültesi
Biyofizik Anabilim Dalı
Genişletilmiş İkinci Baskı

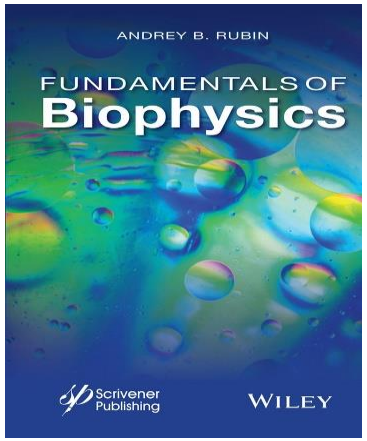

HERMAN T. EPSTEIN
Çeviren
CEMİL KARADENİZ
BİYOFİZİĞE
GİRİŞ
ÇAĞLAYAN KİTABEVİ
BEYOĞLU – İSTANBUL

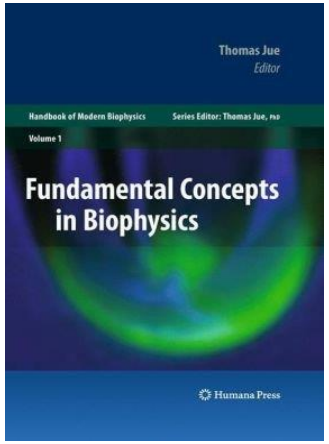

Biophysics
DeMYSTiFieD
Hard stuff made easy
Covers MOLECULAR, subcellular, and PHYSIOLOGICAL BIOPHYSICS
LOADED with detailed EXAMPLES and explanations
Perfect for SELF-STUDY or as a classroom SUPPLEMENT
COMPLETE with end-of-chapter QUIZZES and a final EXAM
Daniel Goldfarb

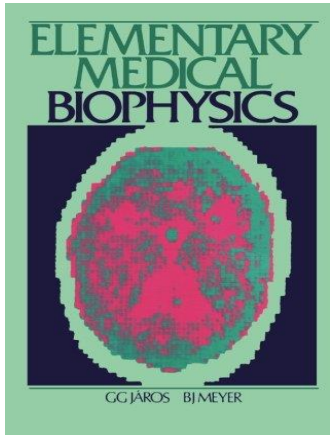

Making Everything Easier
Biophysics
FOR
DUMMIES
A Wiley Brand
Learn to:
Ken Vos, PhD

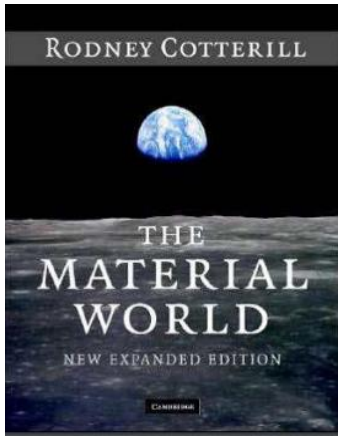

Roland Glaser
Biophysics
An Introduction
Second Edition
Springer

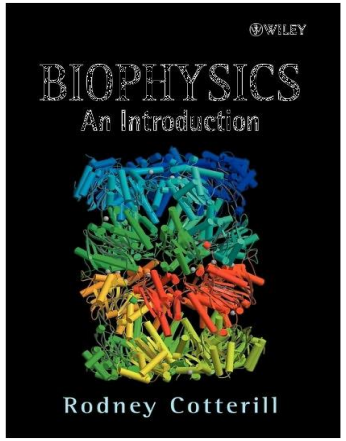

HELMUT SCHIESSEL
Biophysics for Beginners
A Journey Through The Cell Nucleus

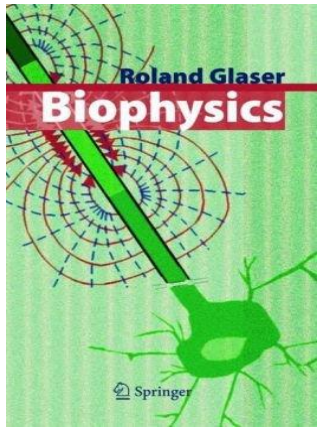

ANDREY B. RUBIN
FUNDAMENTALS OF
Biophysics
Scrivener Publishing
WILEY


Thomas Jue
Editor
Handbook of Modern Biophysics
Volume 1
Fundamental Concepts in Biophysics
Humana Press


ELEMENTARY
MEDICAL
BIOPHYSICS
GG JÁROS BJ MEYER


RODNEY COTTERILL
THE
MATERIAL
WORLD
NEW EXPANDED EDITION


WILEY
BIOPHYSICS
An Introduction
Rodney Cotterill


Roland Glaser
Biophysics
Springer