NORGES TEKNISK-
NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET,
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Arne Mikkelsen,
Tlf.: 93433

EKSAMEN I EMNE 74635 MOLEKYLÆR BIOFYSIKK

Mandag 29. november 1999
Tid: 0900 - 1400

Hjelpemidler:
- B2 - Typegodkjent kalkulator, med tomt minne, i henhold til liste utarbeidet av NTNU,
- K. Rottmann: Matematisk formelsamling (norsk eller tysk utgave),
  eller Barnett & Cronin: Mathematical Formulae,
- Aylward & Findlay: SI Chemical data,
- Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk.
- NB: I tillegg til formelsamlingene fins formler og data på siste sider.

Sensuren faller i uke 51.
Ved bedømmelsen teller hver deloppgave a,b, etc. like mye (totalt 11 vekttall).

Oppgave 1.

a) x-koordinaten for ende-til-ende vektoren for et statistisk kjedemolekyl (Gauss-kjede) med den ende enden holdt fast i origo er gitt ved fordelingsfunksjonen:

$$P_{x,\mathrm{eq}}(x) = \left(\frac{3}{2\pi(N-1)Q^2}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{3x^2}{2(N-1)Q^2}\right\}$$

Tilsvarende gjelder for y og z-koordinatene.

Definer størrelsene Q og N i likningen over. Utled uttrykk for fordelingsfunksjonen $P_{\mathrm{eq}}(\vec{\boldsymbol{r}}_{\mathrm{e-e}})$ for ende-til-endevektoren i tre dimensjoner og for fordelingsfunksjonen $P_{\mathrm{eq}}(r_{\mathrm{e-e}})$ for ende-til-endeavstanden i tre dimensjoner.

b) Statistiske kjedemolekyler har fullstendig ukorrelerte segmenter og derfor indre energi uavhengig av ende-til-endeavstanden, forutsatt at denne er mindre enn en viss maksimumsverdi. Likevel viser det seg at den midlere kraften som skal til for å opprettholde en viss ende-til-endevektor øker med økende ende-til-endeavstand. Gjør rede for hvorfor det er slik og utled et uttrykk for den kraft som er nødvendig for å opprettholde en viss verdi av ende-til-endevektoren.

Oppgave 2.

a) Ved diffraksjonsstudier gir den komplekse spredeamplituden $A^*(\vec{\boldsymbol{\Delta k}})$ styrken av strålingen spredt i retning $\vec{\boldsymbol{\Delta k}}$. Forklar og definer spredevektoren $\vec{\boldsymbol{\Delta k}}$ og vis spesielt sammenhengen til spredevinkelen θ. Betrakt spredningen som elastisk.

b) For en kontinuerlig heliks med radius r_0 og stigning pr. tørn ("pitch") lik P gjelder

$$A^*(\vec{\boldsymbol{\Delta k}}) \;\propto\; \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\chi)\exp\{in(\psi+\pi/2)\}\cdot\delta(w-n/P)$$

der J_n er Besselfunksjoner av n-te orden, $\chi = 2\pi \cdot Rr_0$ og δ er Diracs deltafunksjon. Spredevektoren $\vec{\boldsymbol{\Delta k}}$ er gitt i sylinderkoordinater $\{R, \psi, w\}$ i det resiproke rommet (w-aksen parallell med heliksaksen).

Skisser ut fra disse opplysningene røntgenfiberdiagrammet for en kontinuerlig heliks. Bruk χ og w som akser og gjør bruk av at

$|J_0(\chi)|$ har maksimum for $\chi = 0$ og $\chi \approx 7$,
$|J_1(\chi)|$ har maksimum for $\chi \approx 2$,
$|J_2(\chi)|$ har maksimum for $\chi \approx 3,5$
$|J_n(\chi)|$ har maksimum for $\chi \approx n+2$ for $n \geq 3$.

Oppgave 3.

a) En løsning består av en blanding av molekyler med ulik molekylvekt, M_i, som gitt i følgende tabell:

Molekyltype i	Relativt antall	M_i/Dalton
1	20 %	10000
2	50 %	20000
3	30 %	100000

Beregn antallsmiddelet, vektsmiddelet og det såkalte z-middelet av molekylvektene.

b) Vis at ved måling av klassisk lysspredning på en løsning som består av en blanding av ulike molekylstørrelser vil man for molekylvekten oppnå et estimat av vektsmiddelet $\langle M \rangle_w$.

Oppgave 4.

OBS: Du skal svare på kun **fem** av de følgende **seks** oppgaver. Velg selv hvilke.
Gi et kort svar ($\frac{1}{2}$ - 1 side) for hver oppgave.

a) Gjør rede for hva som menes med bindings- og antibindingsorbitaler. Angi på diagrams form energien til bindings- og antibindingsorbitaler som funksjon av avstanden mellom kjernene for et homonukleært diatomig molekyl (f.eks. H_2^+). Forklar hvorfor man ut fra enkel orbitalteori forventer at H_2 er mer stabilt enn He_2.

b) Hvilke molekylære strukturer (orbitaler) finner vi ofte i stoffer som absorberer lys i den synlige delen av spekteret (f.eks. kromoforer i naturen)? Forklar sammenhengen med eksitasjon av energinivåer i slike orbitaler.

c) Forklar hva som menes med eksklusjonskrefter i en løsning som består av en blanding av store og små molekyler.

d) Cellemembranen i den røde blodcella (erythrocytten) består i tillegg til lipiddobbeltlaget av et todimensjonalt gelnettverk. Forklar kort hvordan membranen er oppbygd og hvilken betydning gelnettverket har for celleformen til erythrocyttene.

e) TEM, STEM og SEM er tre ulike moder som brukes i et moderne elektronmikroskop. Forklar kort hva som er spesielt med hver av disse modene og hvilke fordeler og ulemper hver enkelt mode har. Omfattende tegninger kreves ikke.

f) For optimalisering av et NMR-spekter må instrumentet "shimmes" før bruk. Hva innebærer denne shimmingen teknisk sett og hvordan måles effekten av shimming?

Oppgitte formler og data som du kan få bruk for. Du må selv tolke symbolene, men du trenger ikke bevise formlene du bruker.

Termodynamikk $G = H - TS \qquad A = U - TS \qquad \vec{\boldsymbol{F}} = -\vec{\boldsymbol{\nabla}} A$

$S = k_B \ln W$

Debyes skjermingslengde $\lambda_D^2 = \dfrac{\epsilon k_B T}{\sum_i (eZ_i)^2\, n_{i\infty}}$

van't Hoffs lov $\pi = p_2 - p_1 = \Delta n RT$

Energinivåer for elektroner i konjugerte bindinger $E_n \simeq \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e (bN)^2}\, n^2$

Friksjonskoeffisienter $\vec{\boldsymbol{F}} = f_T \cdot \vec{\boldsymbol{v}}, \qquad \vec{\boldsymbol{M}} = f_R \cdot \vec{\boldsymbol{\omega}}$

$F_T' = f_T / f_{0,T}, \quad F_R' = f_R / f_{0,R}$

Stokes formler $f_{0,T} = 6\pi\eta R, \qquad f_{0,R} = 8\pi\eta R^3$

Hydrodynamisk volum $v_{h,i} = m_i \left(\bar{V}_i^{(S)} + \delta \cdot V_0^{(S)} \right)$

Nernst-Einsteins relasjoner $f_T D_T = k_B T, \qquad f_R D_R = k_B T$

Lamm-likningen $\dfrac{\partial c(r,t)}{\partial t} = D_T \left(\dfrac{\partial^2 c(r,t)}{\partial r^2} + \dfrac{1}{r} \dfrac{\partial c(r,t)}{\partial r} \right) - s\omega^2 \left(r \dfrac{\partial c(r,t)}{\partial r} + 2c(r,t) \right)$

Spredning fra molekyler $I(\vec{\boldsymbol{\Delta k}},\, t) \propto \underbrace{\left| P^* \left(\frac{\vec{\boldsymbol{\Delta k}}}{2\pi},\, t \right) \right|^2}_{\text{strukturfaktor}} \cdot \underbrace{\left| \Xi^* \left(\frac{\vec{\boldsymbol{\Delta k}}}{2\pi},\, t \right) \right|^2}_{\text{formfaktor}}$

Statisk lysspredning $\dfrac{\kappa c}{R_\theta} = \dfrac{1}{M} \left[1 + \dfrac{16\pi^2}{3\lambda_1^2} \cdot R_G^2 \cdot \sin^2 \left(\dfrac{\theta}{2} \right) \right] \cdot [1 + 2B_2 c],$

hvor (for upolarisert lys): $R_\theta = \dfrac{I(\theta)\, r^2}{I_0\, (1 + \cos^2\theta)}, \quad \kappa = \dfrac{2\pi^2 n_L^2 (\mathrm{d}\tilde{n}/\mathrm{dc})^2}{N_A \lambda_0^4}$