

Medmolekulske interakcije

HELLO!





Kako se lepijo površine med seboj ?

z izsesavanjem zraka ...

površina POST-IT



Kako se lepijo površine med seboj ?

preko izločanja sladkorjev, smol ...

površina muhine okončine

Gecko

Kako se lepijo površine med seboj ?

Lamellæ

preko privlaka polariziranih
elektronskih oblakov ...

Setæ

površina Geckove okončine

x48,000

1 μm

Spatulæ

x3,500

10 μm

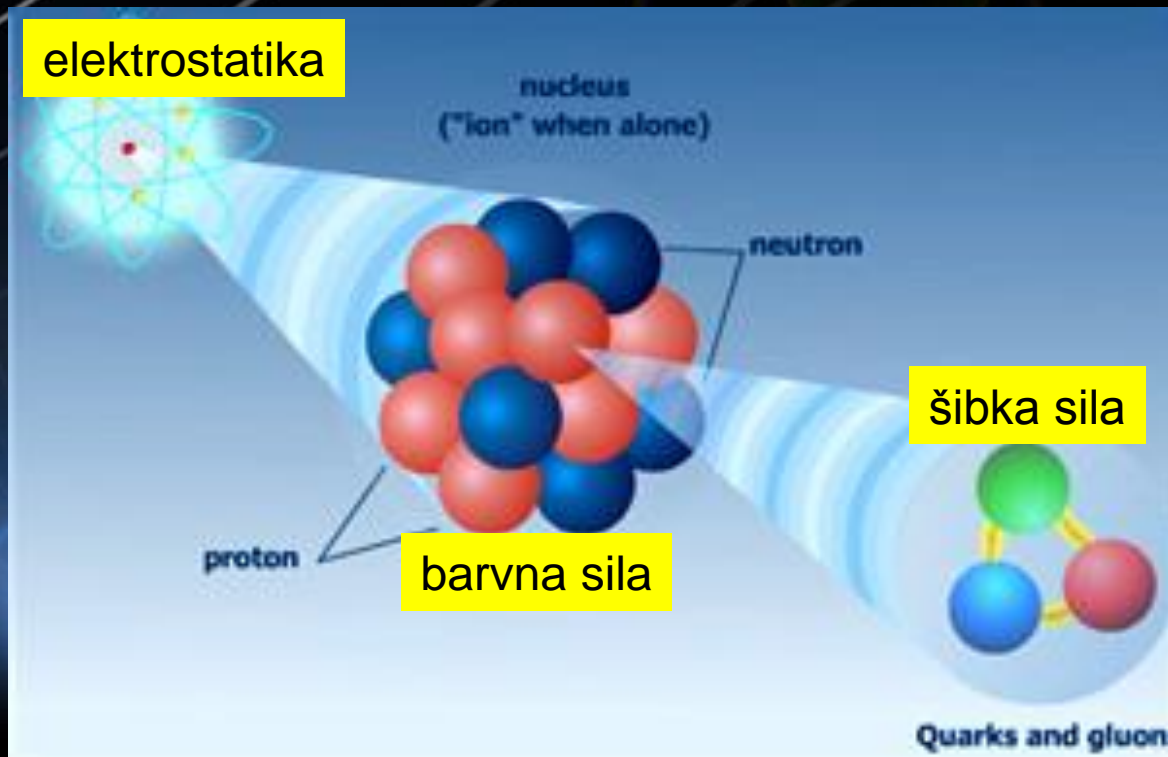
Medmolekulske interakcije



Osnovne sile

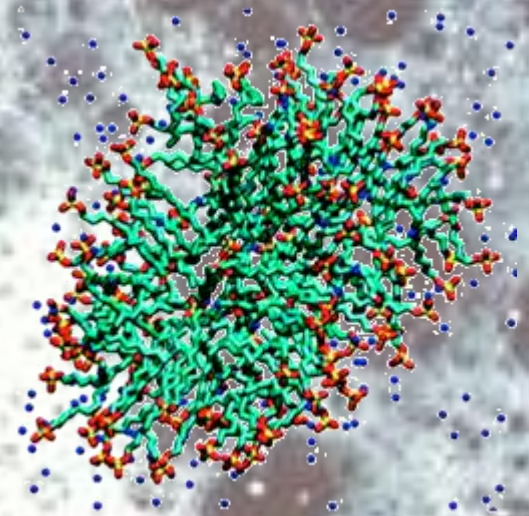
gravitacija

elektrostatika



V molekularnem svetu ...

... kraljujejo interakcije na osnovi elektrostatskih sil !
(disperzija detergenta)



Najlažji nabit delec odloča

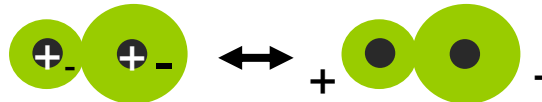
- **Elektroni** imajo negativen naboj, so nosilci elektrostatskih interakcij.

-

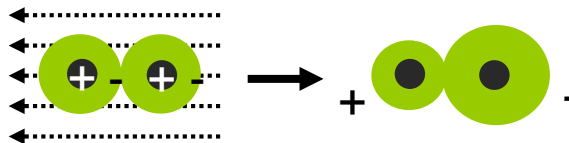
- So zelo lahki delci, zato so porazdeljeni okoli mnogo težjih jeder s pozitivnim nabojem. Elektroni tvorijo **elektronske oblake/orbitale**.



- V molekuli dveh različnih atomov, prevzame eno jedro v povprečju več elektronov kot drugo. Razmakneta se težišči negativnega in pozitivnega naboja. Nastane **fiksen električni dipol**.

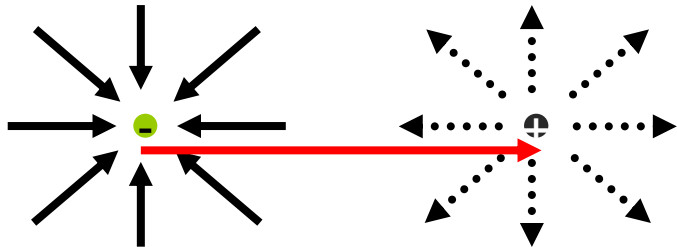


- Težišča nabojev pa se razmaknejo tudi pod vplivom zunanjih ali lokalnih električnih polj. Tako nastanejo **inducirani električni dipoli**.



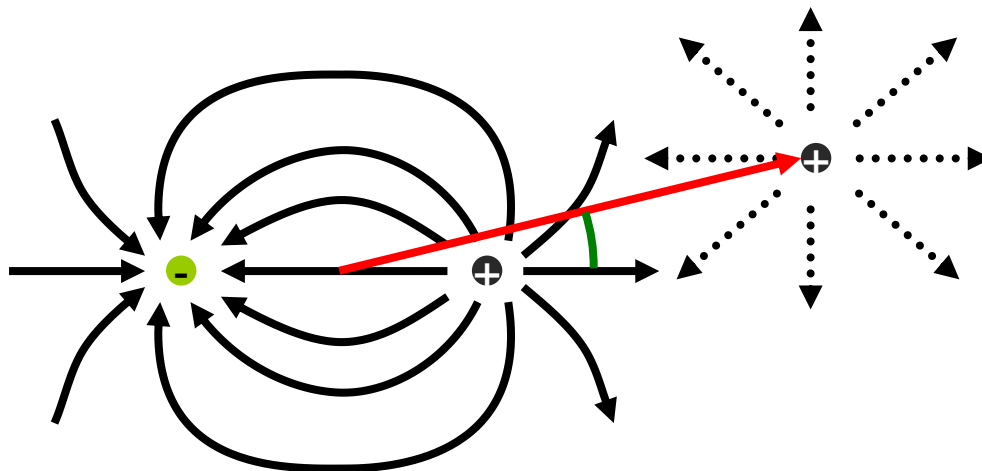
Na kakšen način komunicirajo

- Električna (Coulombova) interakcija



$$W \propto e_1 e_2 \frac{1}{r}$$

- Električna dipolna interakcija



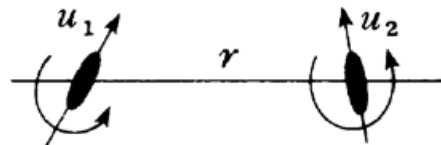
$$W \propto e_1 u_2 \frac{\cos(\varphi)}{r^2}$$

$$u_2 = ed$$

Van der Waalsove interakcije

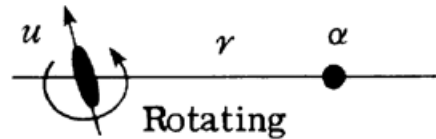
- Dipolne interakcije na osnovi polariziranih elektronskih oblakov

– Keesom



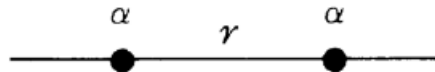
$$W \propto \frac{kT}{r^6}$$

– Debye



$$W \propto \frac{\alpha}{r^6}$$

– London



$$W \propto \frac{\alpha^2}{r^6}$$

- Ne pozabimo vedno prisotnega odboja pri majhnih razdaljah (**izključitveno načelo**: dva elektrona ne moreta biti na istem mestu ob istem času, zato elektronski oblak ne more v drugega)

Kvantno mehanske interakcije

- Interakcije na osnovi **elektronskih parov**, v katerem se dva elektrona nahajata z različnimi lastnostmi (spinom).

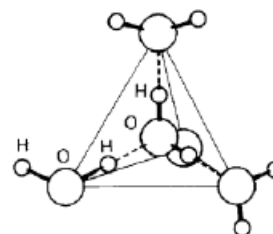
- **Kovalentna vez**

(co-valence; atoma si delita elektronski par)

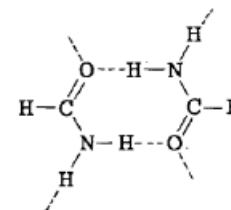
- **Vodikova vez**

(H deli vezni par z dvema atomoma kisika, ker je dovolj lahek, tvori vez med dvema paroma elektronov)

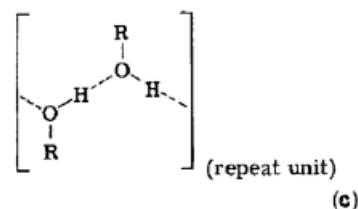
- pogoj za to, je velika elektronegativnost akceptorja protona



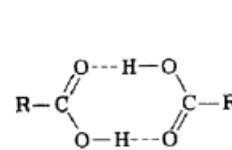
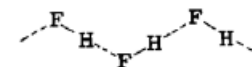
(a)



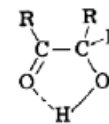
(b)



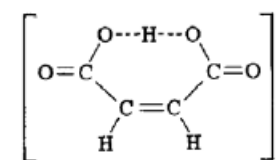
(c)



(d)



(e)



(f)

Temperatura

- V molekularnem svetu primerjamo energije interakcij s termično energijo:

pri $T=310\text{ K}$ (37°C) je $kT = 0.025\text{ eV}$

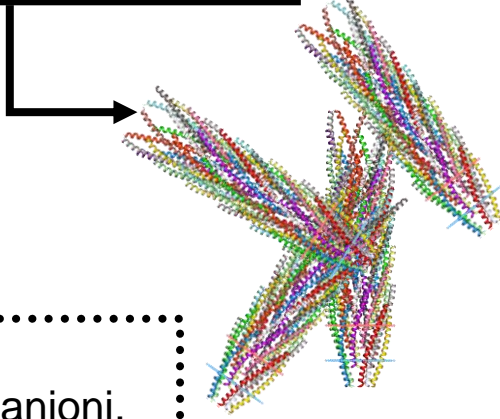
<i>interakcija</i>	<i>energija</i>		<i>razmerje proti kT</i>
	kJ/mol	eV	kT
kovalentna	200 - 900	2 - 9	80 - 350
ionska	400 - 800	4 - 8	150 - 300
van der Waalsova	2 - velika	0.02 - velika	1 - veliko
vodikova	5 - 25	0.05 - 0.25	2 - 10

A yellow teapot is shown in the center of the frame, surrounded by a dense, expanding cloud of fine yellow particles. The particles are most concentrated around the teapot and spread outwards, creating a visual representation of dispersion. The background is a plain, light gray.

Poglejmo v disperzijo delcev

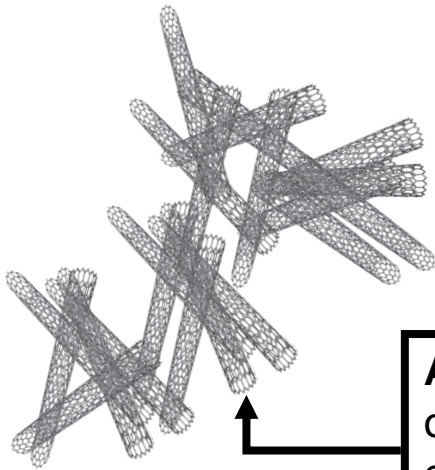
Proteinski agregati:

Proteini v virusnih plaščih ali pri amiloidozah



Pufer:

fosfatni in nitratni anioni,
kalijeve in natrijeve kationi

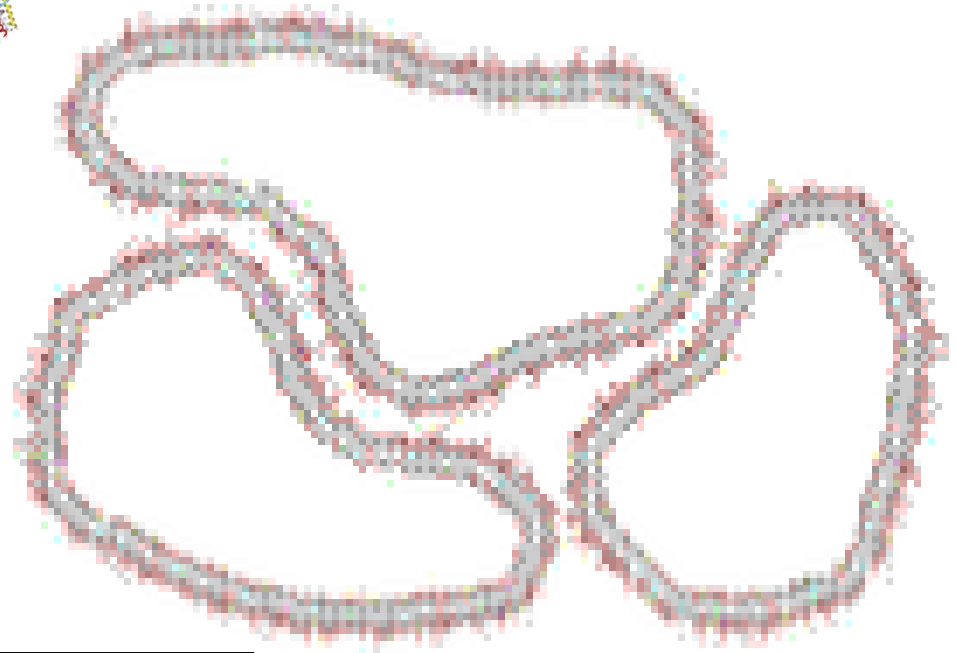


Agregati nanodelcev:

ogljikovi, titanatni,...
disociirane hidroksilne
skupine na površini

Skupki lipidnih vesiklov:

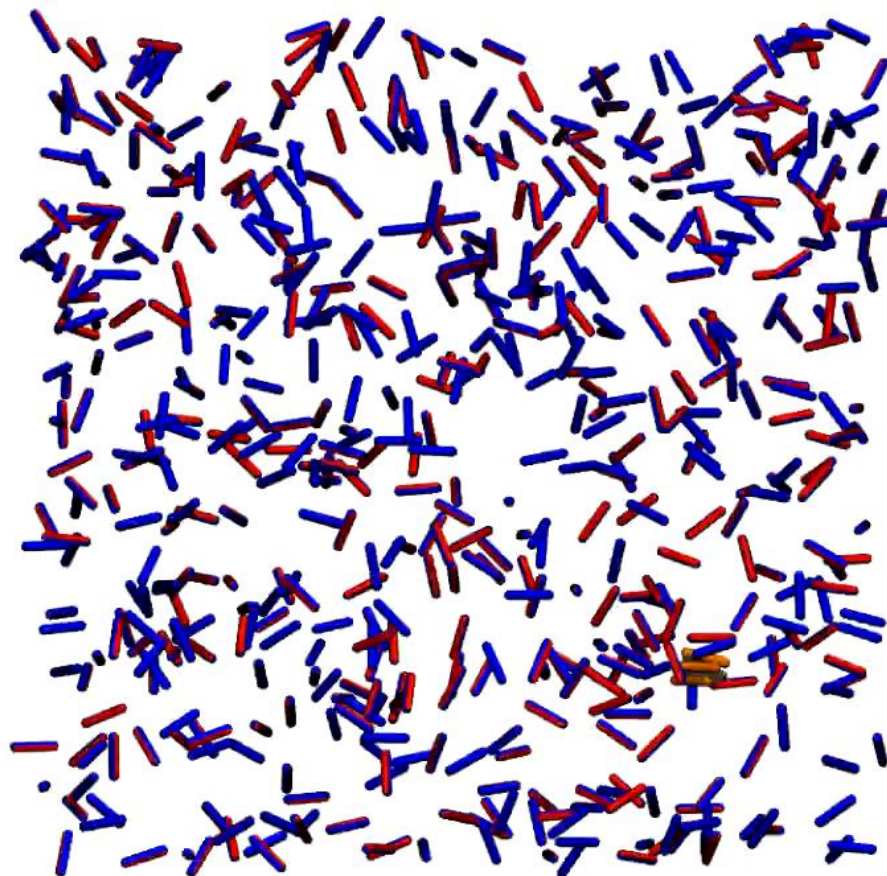
Zwitterionski fosfolipidi,
disociirani fosfolipidi,
disociirani glikosfingolipidi



Agregacija proteinov v fibrile

Coarse grained MD

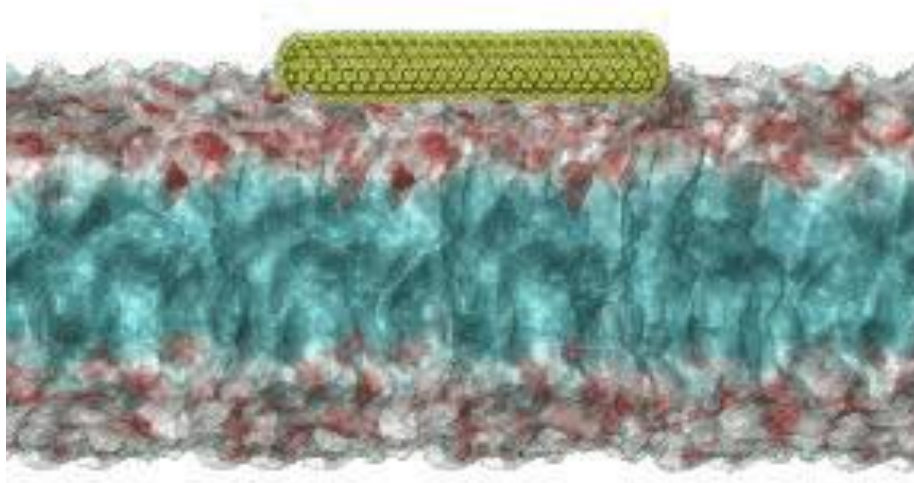
**Množica
patofizioloških problemov
povezanih z agregacijo**



Vdor ogljikove nanocevke v membrano

Full atom MD (+ABF): POPC + 5 nm SWCNT, 150 ns

Množica
novih nepredvidljivih
nanomaterialov



Kraszewski et
al.
PLOS ONE **7(7)**
(2012)

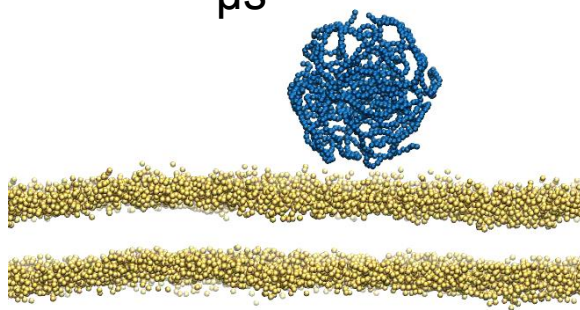
„Raztapljanje“ polimernega nanodelca v membrani

Coarse grained MD: POPC + 11×PS100 verig, premer delca 7 nm, 1 – 10 μ s

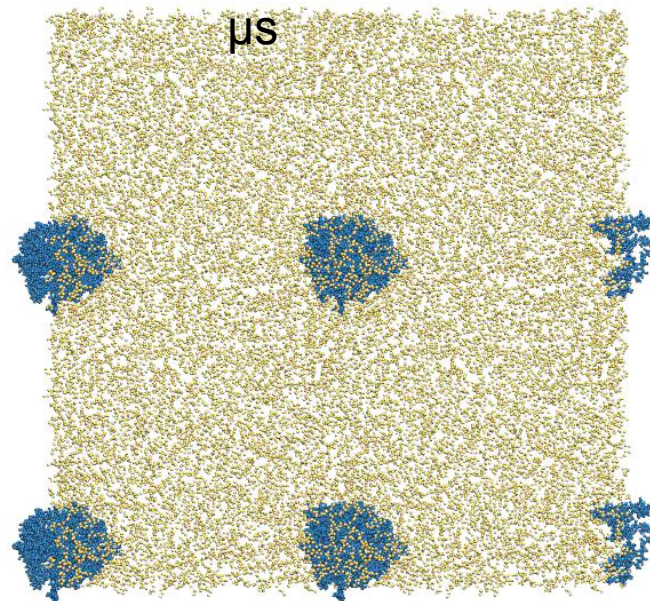
Degradacija polimernih
odpadkov



čas: 1
 μ s

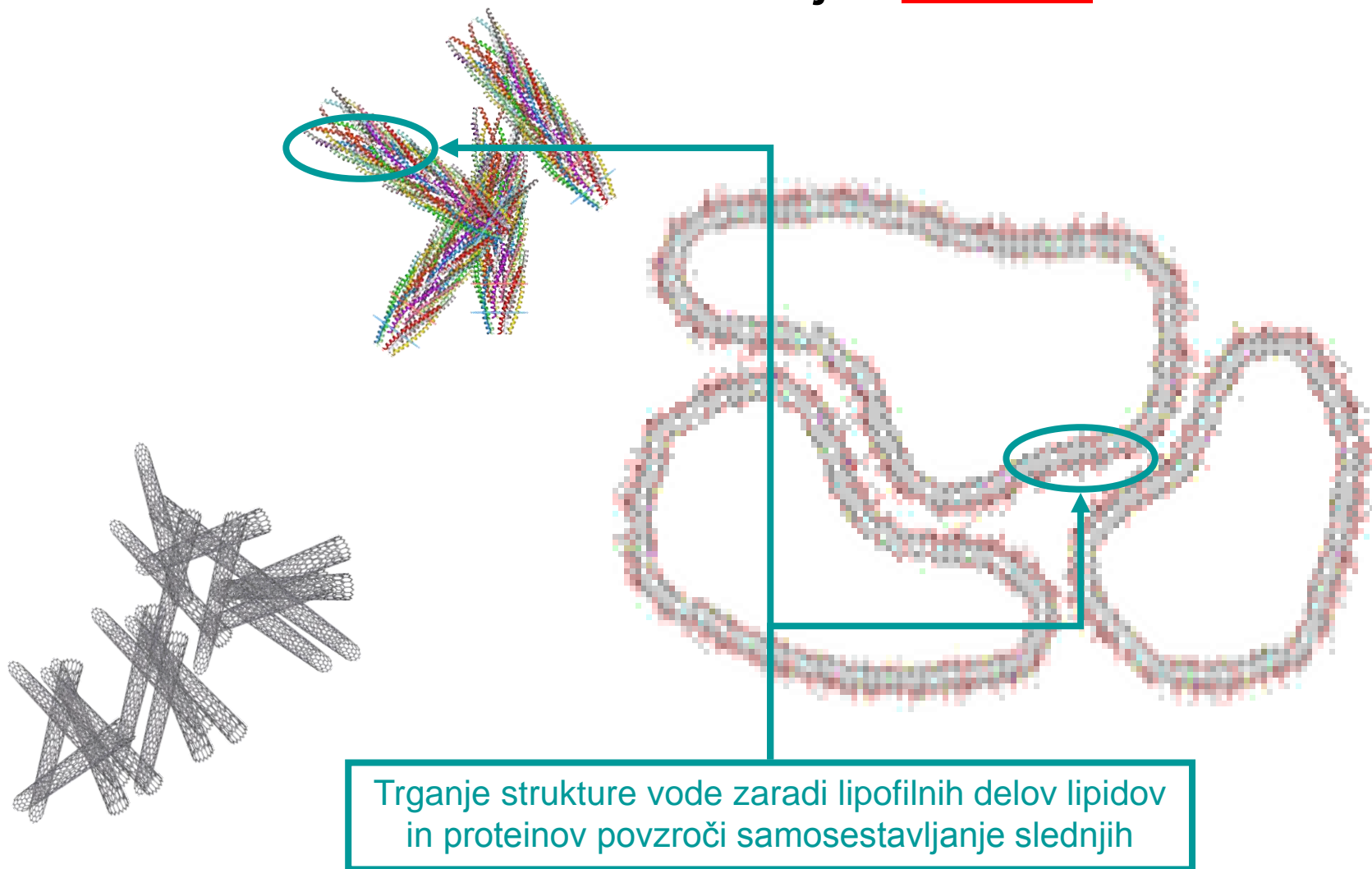


čas: 10
 μ s

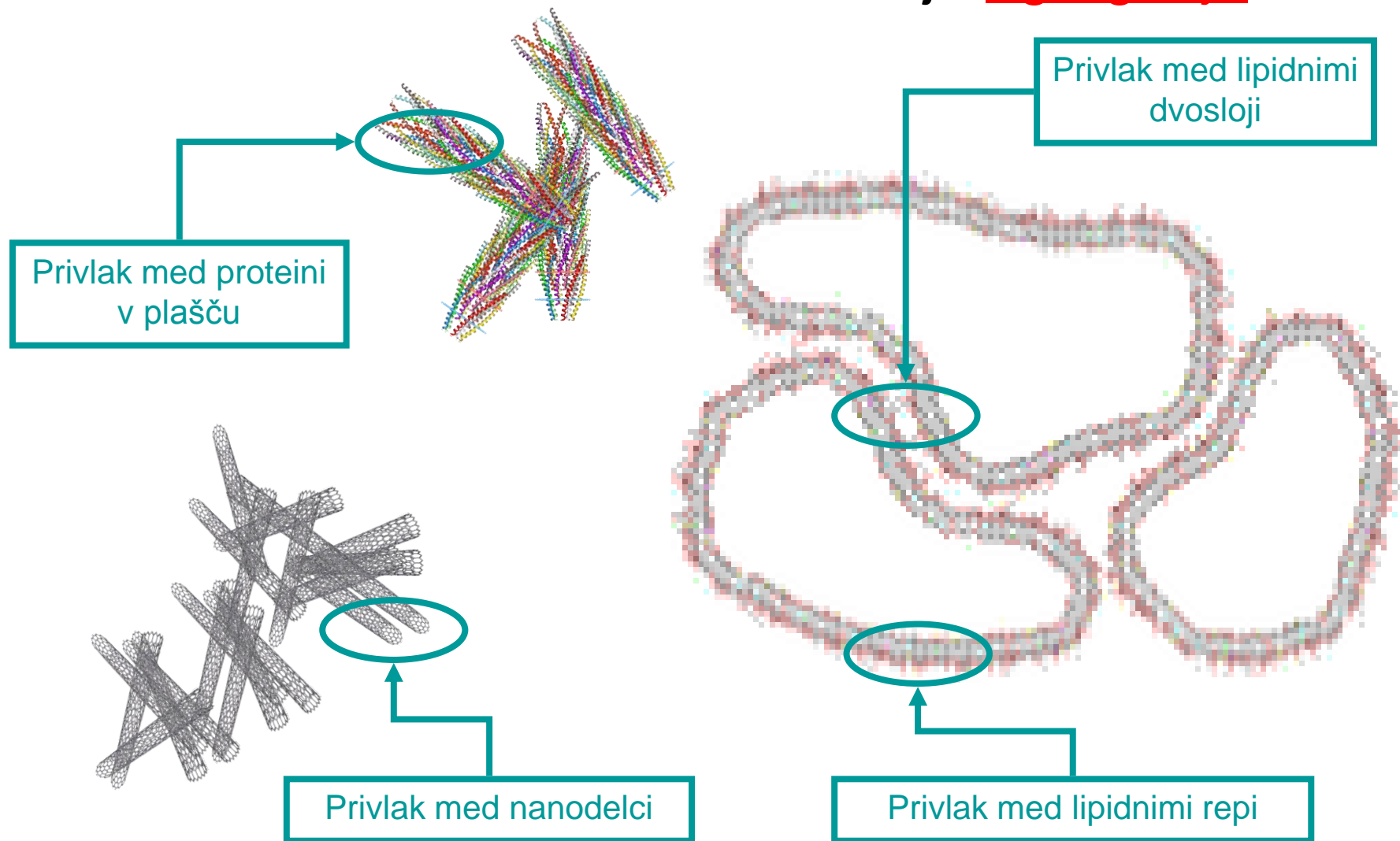


Rossi et al.
J Phys Chem Lett
5 (2014)

Hidrofobna “interakcija” sestavi

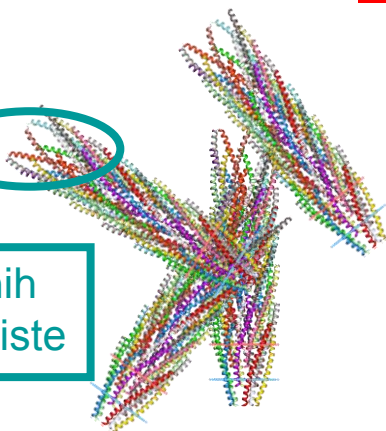


Van der Waalsove interakcije agregirajo

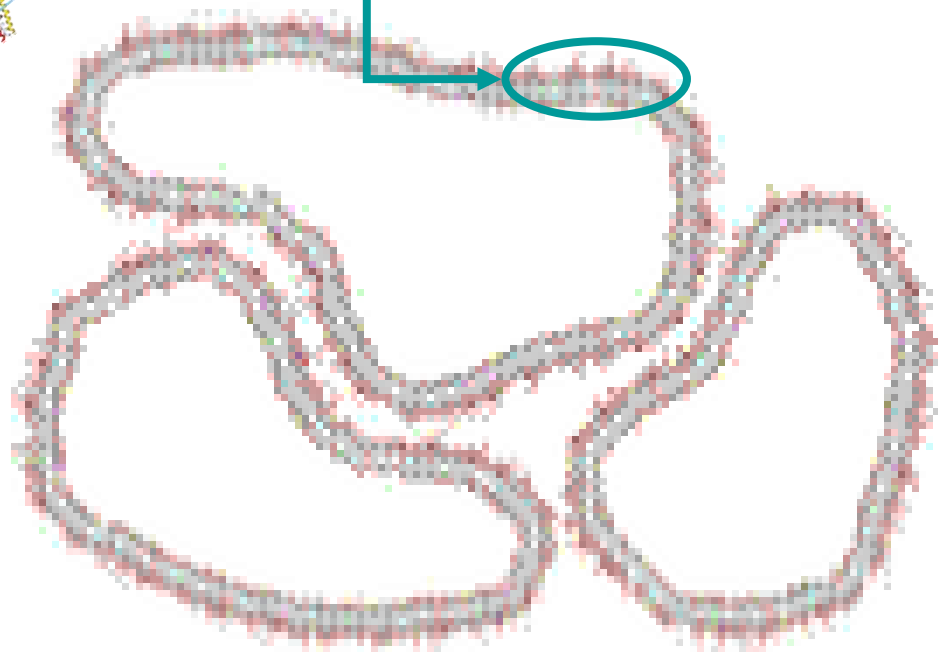


Vodikove vezi stabilizirajo

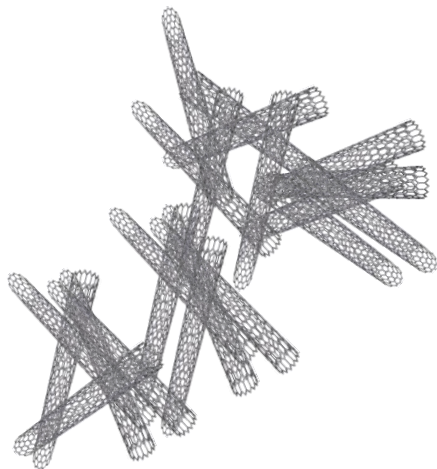
Vodikove vezi v proteinih stabilizirajo vijačnice ali liste



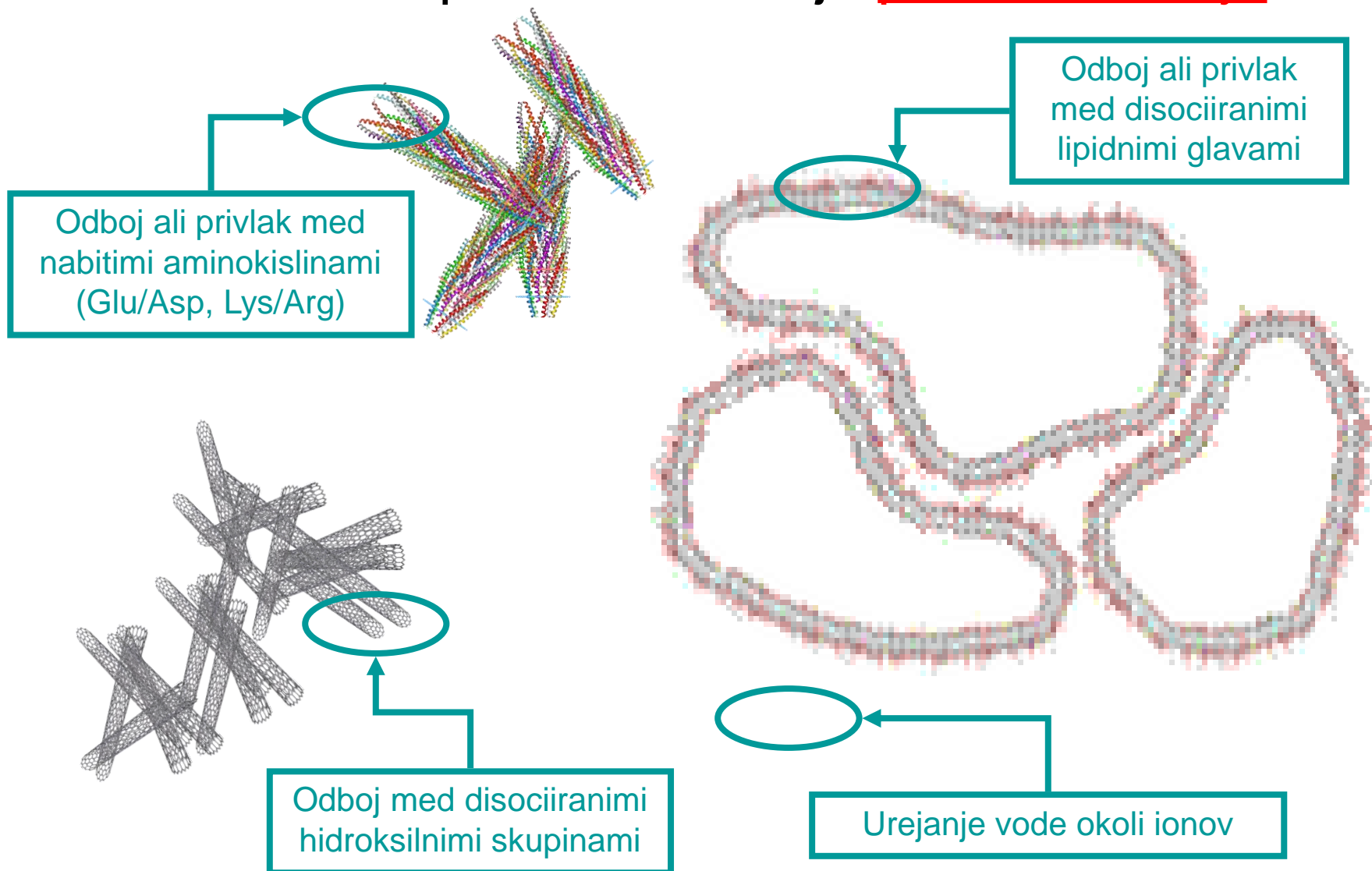
Vodikove vezi povezujejo sfingozin in holesterol ter sladkorne enote v glikolipidih



Vodikove vezi strukturirajo vodo

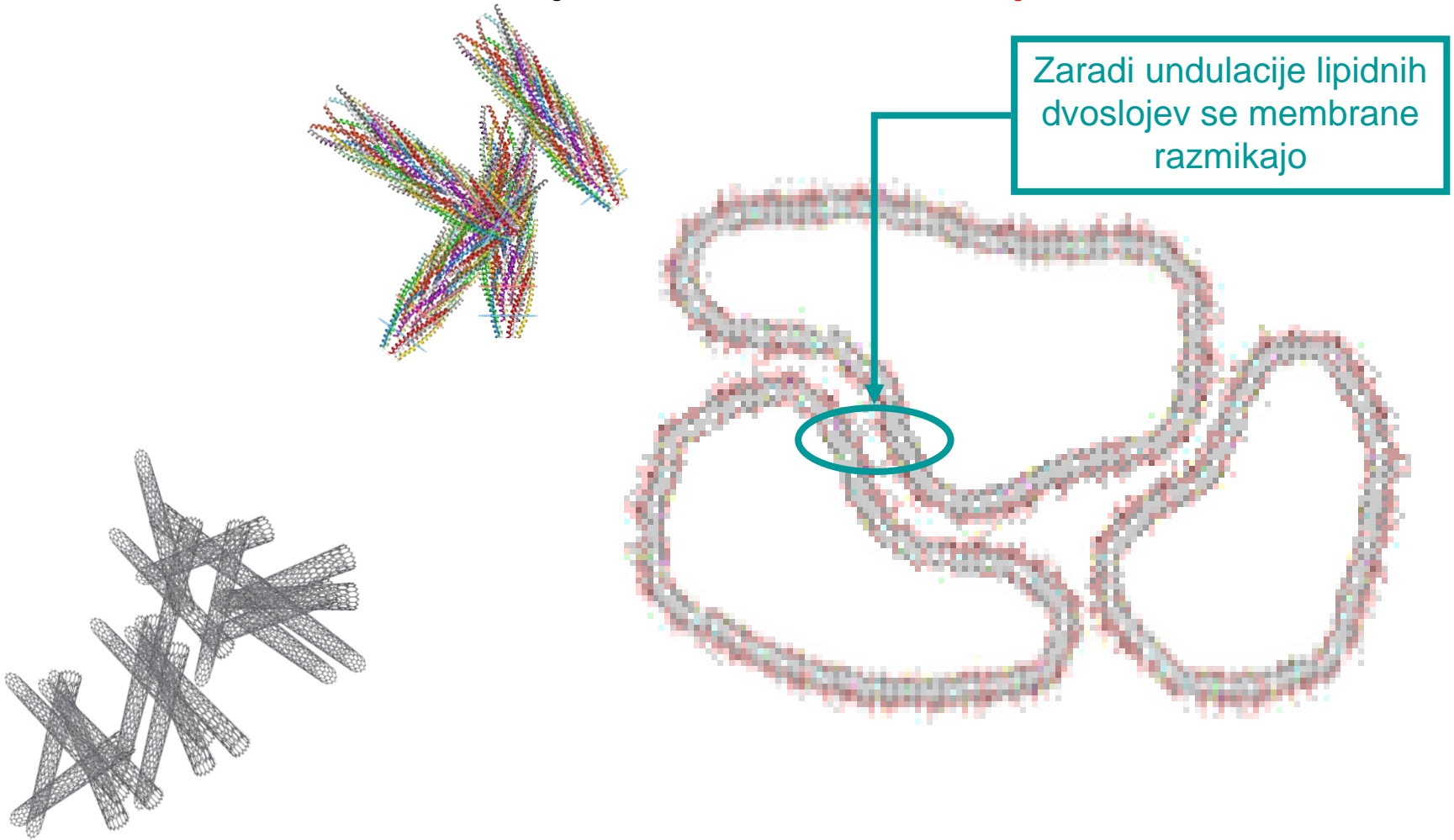


Ionske in dipolne interakcije prestrukturirajo

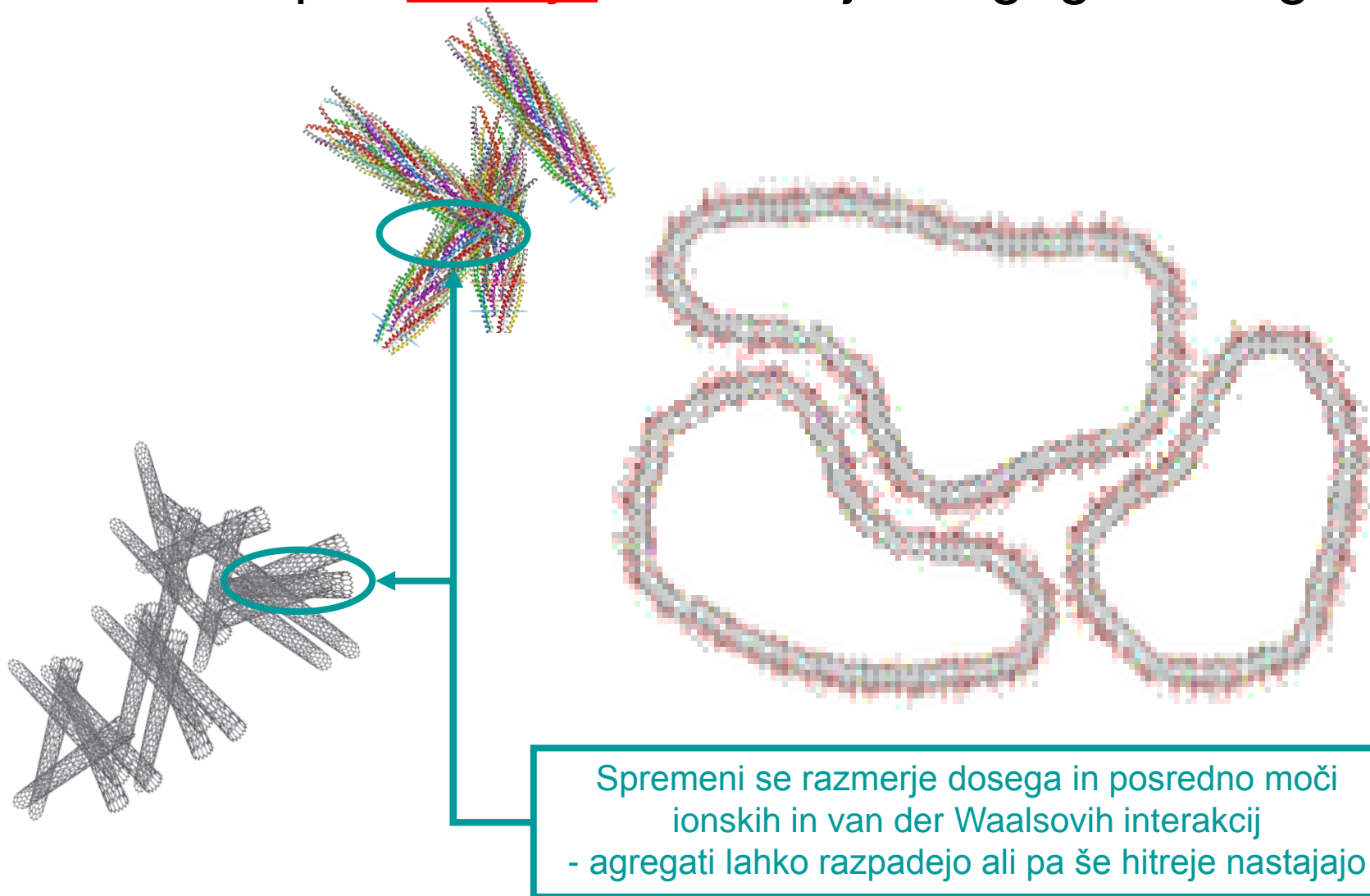


Fluktuacijske sile razmikajo

Zaradi undulacije lipidnih dvoslojev se membrane razmikajo



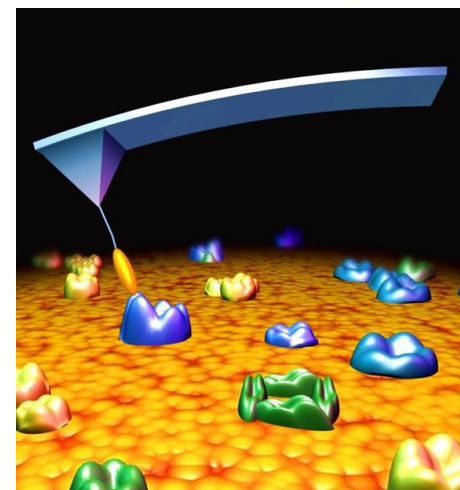
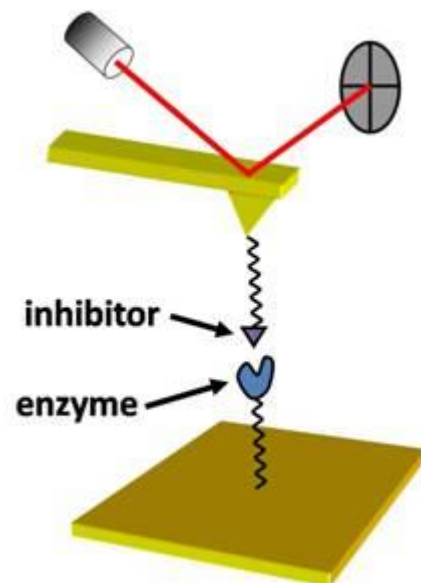
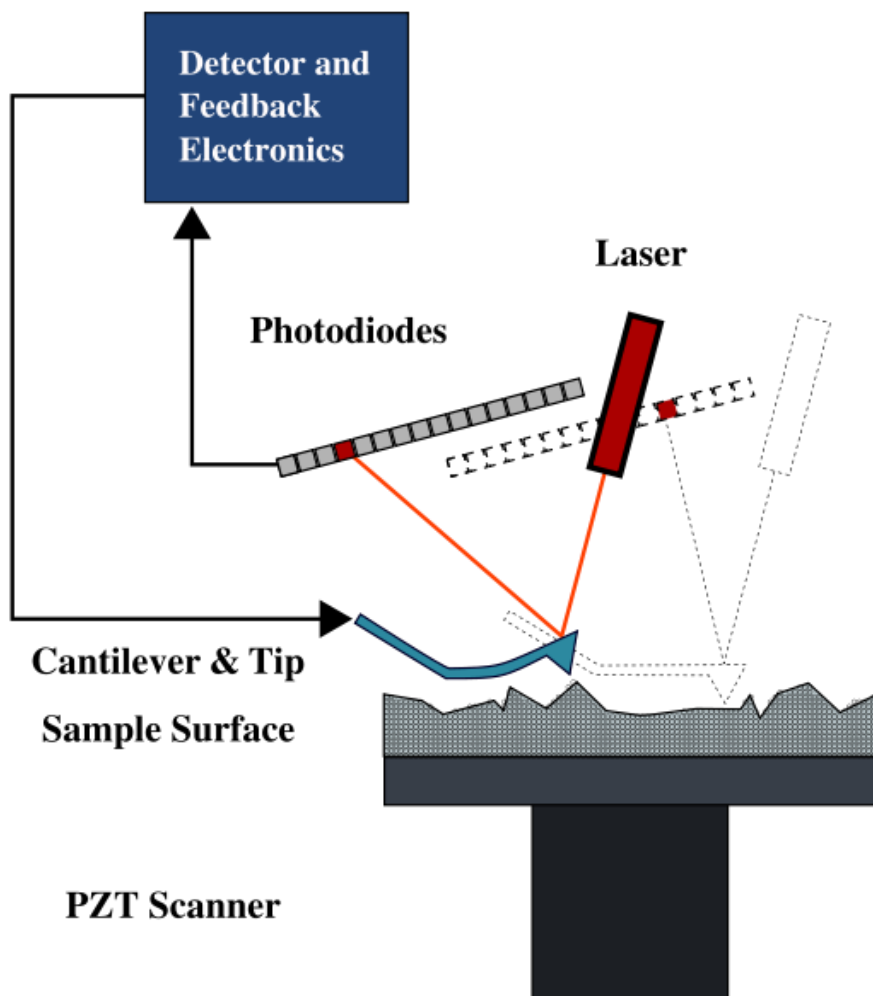
Ioni v raztopini senčijo interakcije dolgega dosega





Kako pa bi pogledali med molekule ?

Slepi s paličico vidi več – Mikroskopija na atomsko silo (AFM)



Razvijmo protein in poglejmo rast membranske domene

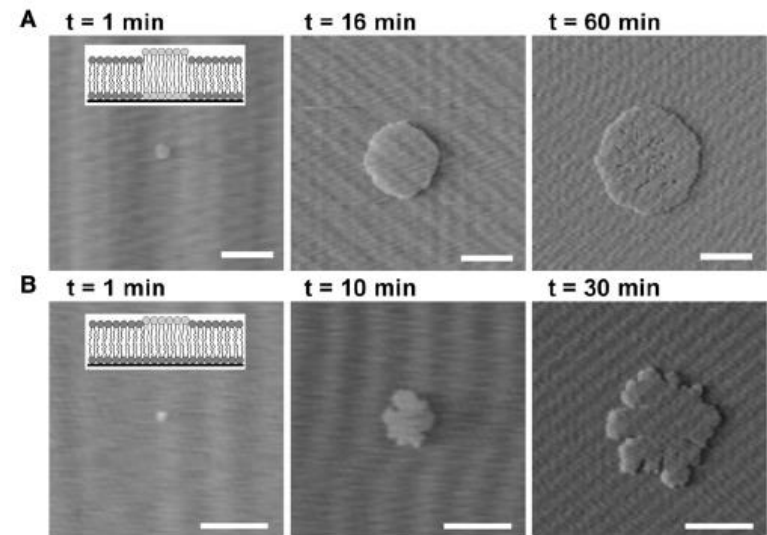
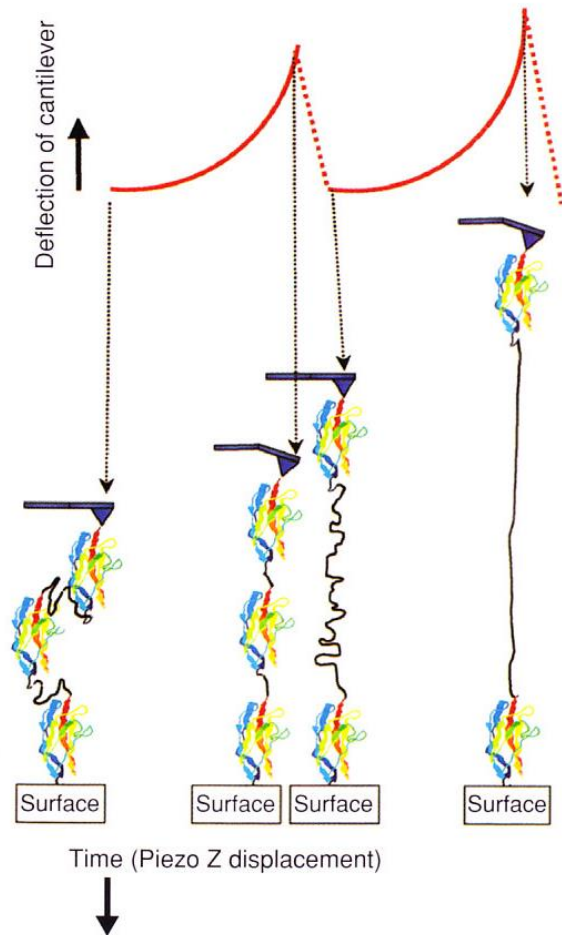
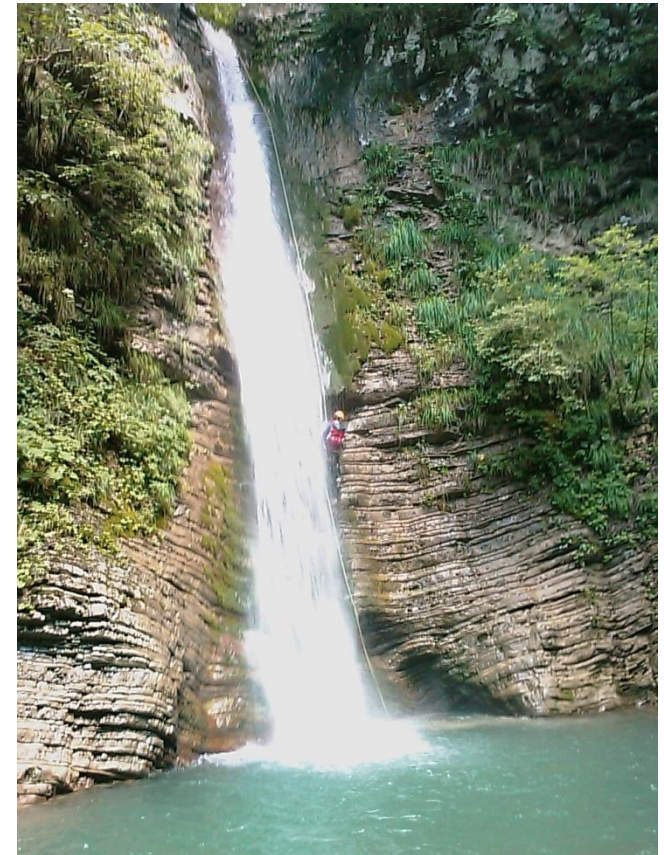
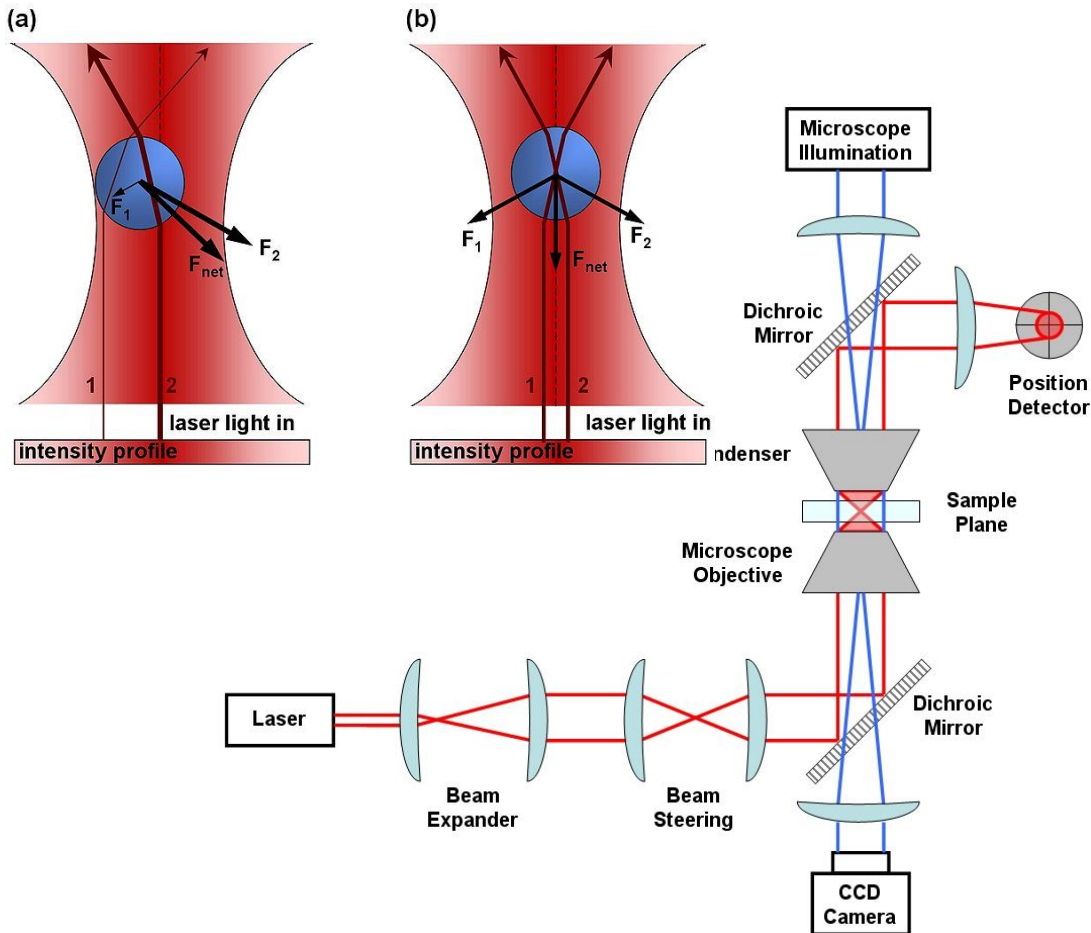


Fig. 5. Sequential series of AFM images presented in deflection mode demonstrating D5PC domain growth upon quenching to (A) held at 1 °C below liquidus temperature at $t = 1, 16, 60$ min in a DOPC/D5PC supported lipid bilayer, note the rounded growth. (B) held at 4 °C below liquidus temperature at $t = 1, 10, 30$ min in a DOPC/D5PC supported lipid bilayer, note the more leafy growth. Scale bar 5 μm .

Tudi slap nas ne pusti iz svojega stržena – Optična pinceta



Kako vlečejo molekularni motorji?

