

Termodinamika na molekularnem nivoju

Kuhamo – kaj je to?

- Ko dovajamo energijo, dvigujemo temperaturo in
 - spreminjamo strukture
 - spreminjamo porazdelitev



Stanje in ravnovesje

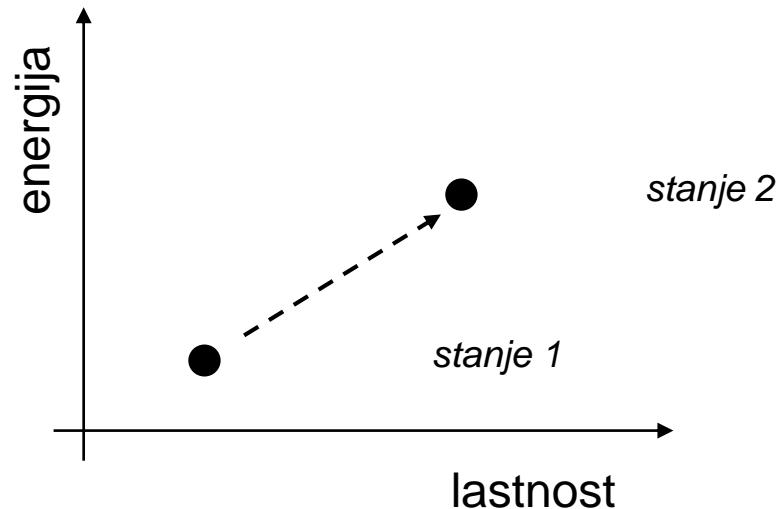
- Kljub temu, da je v ravnovesju, ga lahko majhna motnja potisne daleč iz ravnovesja !



Lahko bi bil kot molekula vode, ki je vezana na protein –
če se pa sprosti, pa jo odnese daleč stran !

Iz enega stanja v drugo

- Ko opravljamo **delo (A)** (proti potencialu) ali ko dovajamo **toploto (Q)**



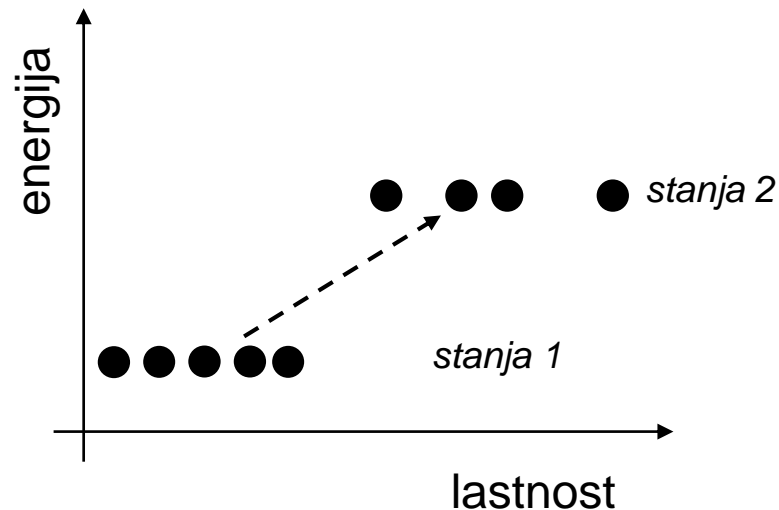
Primeri:

- dvignemo maso
- približamo dva enaka električna naboja
- oddaljimo dve nepolarni molekuli
- razdremo H-vez
- porinemo ion v nepolarno okolje
- razstavimo micelo ali lipidni dvosloj
- denaturiramo protein
- razpnemo DNA



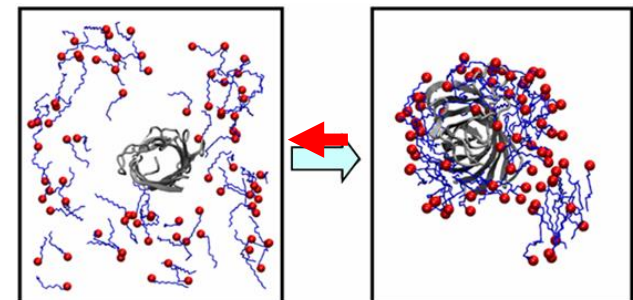
ali v različno kombinacijo drugih (drugačnih) stanj

- Ko prerazporejamo sistem in s tem spreminjamo **entropijo (S)**



Primeri:

- dvigamo enake mase na isto višino vendar v različni smeri
- enakomerno razredčeno skupino enakih električnih nabojev prerazporejamo v bolj razredčeno skupino drobnih gruč
- razstavimo lipidni dvosloj v mnogo micel
- denaturiramo protein, ki zato zapušča agregate



Kam gremo ? - Določa **prosta energija (G)** !

$$G = E - TS$$

$$G = Fx - k_B T \ln P$$

G ... prosta energija

E ... energija (če je makroskopsko definirana, potem entalpija)

T ... temperatura

S ... entropija

F ... sila

x ... premik

p ... število stanj sistema

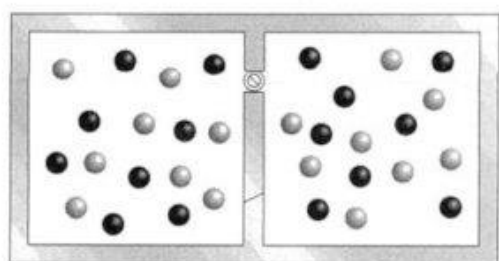
$k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$

Sistem vedno minimizira
prosto energijo:

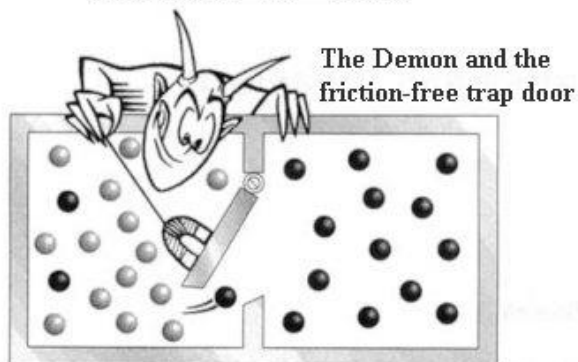
$$\Delta G < 0$$

Nižati entropijo = razlikovati življenje in smrt

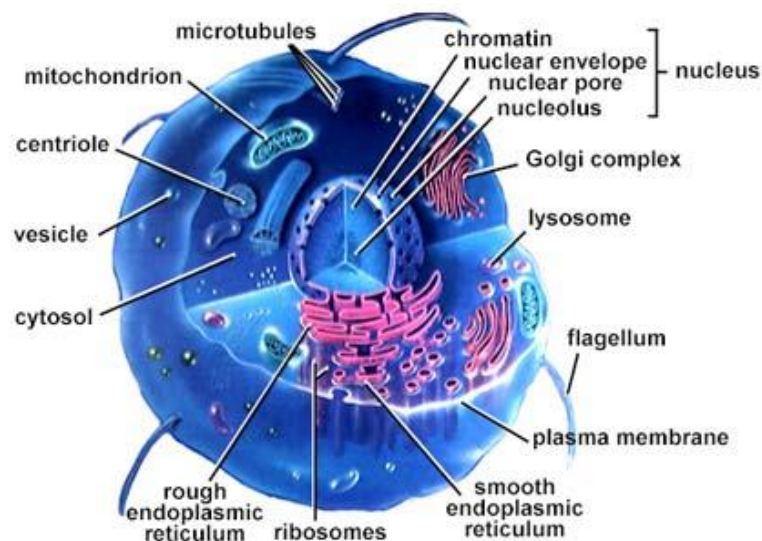
Maxwellov demon in celica



System at Equilibrium

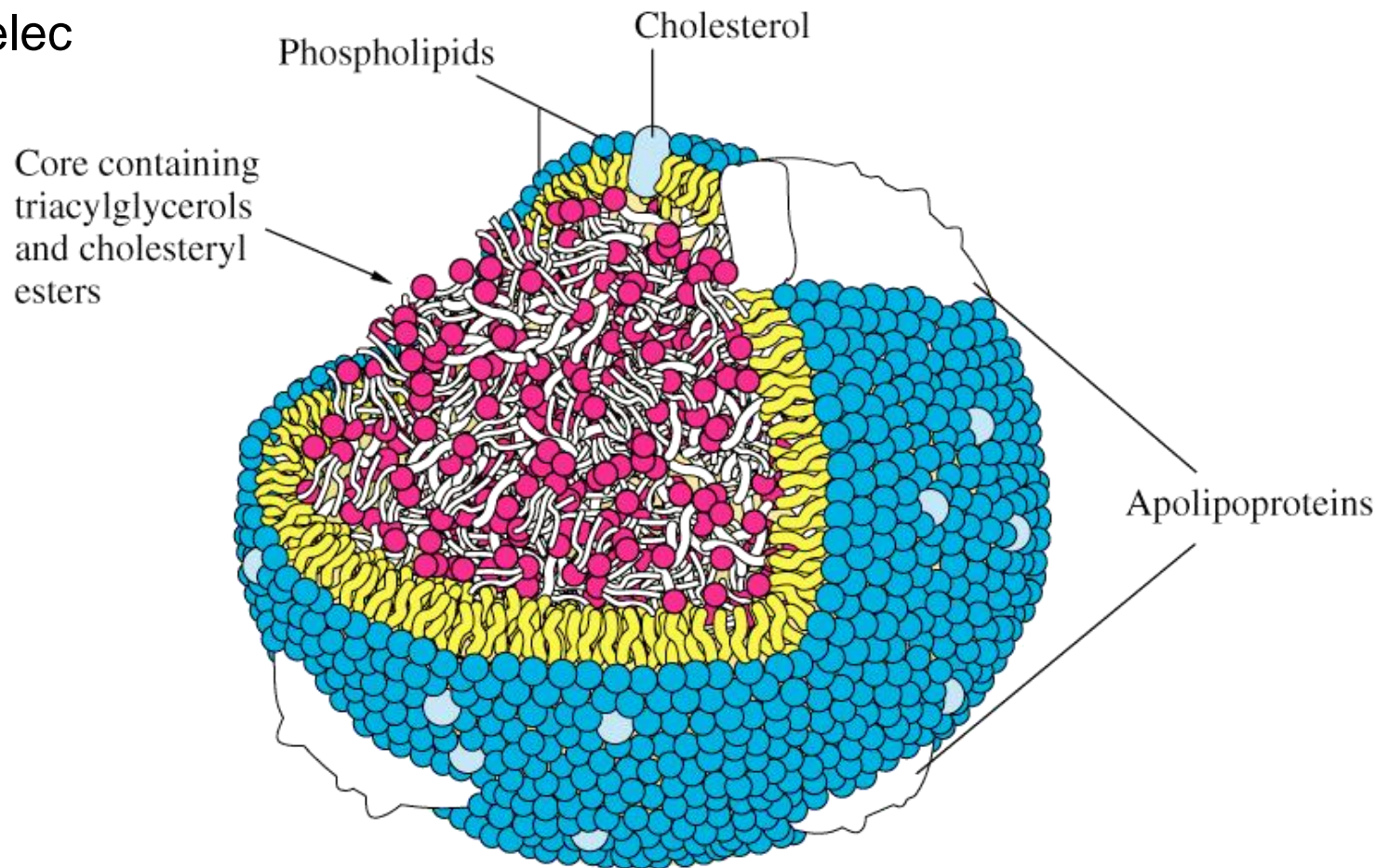


**System with Lower Entropy
(in violation of the Second Law)**



Nižati prosto energijo – nadzorovati prenos maščob

- LDL delec

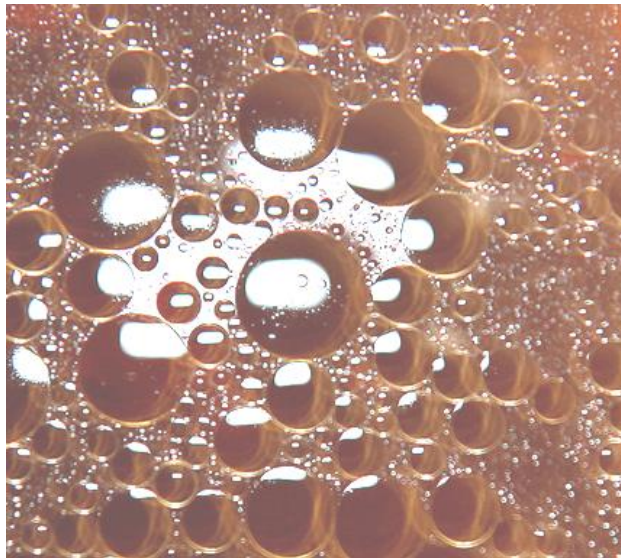


Sprememba temperature

- spremeni porazdelitev med stanji

$$P_2 = P_1 e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$$

Boltzmanova porazdelitev



izločanje maščobe
iz juhe pri ohlajanju



Raztaplanje sladkorja
pri kuhanju marmelade

