1. Rodzaje wiązań

Molekuły potocznie zwane także cząsteczkami powstają wskutek łączenia się ze sobą atomów różnych lub tych samych pierwiastków w układy wieloatomowe lub dwuatomowe.

Aby utworzyć typowe wiązanie chemiczne, potrzeba przynajmniej dwóch elektronów. Istnieją wiązania pojedyncze i wielokrotne, które dzielą się na podwójne i potrójne.

* Wiązanie pojedyncze to wiązanie, które tworzą dwa elektrony
* Wiązanie podwójne to wiązanie, w którym uczestniczą cztery elektrony
* Wiązanie potrójne to wiązanie, w którym uczestniczy sześć elektronów

Kiedy suma energii poszczególnych atomów w stanie swobodnym jest większa od energii cząsteczki dochodzi do połączenia się ze sobą atomów. Dochodzi wtedy do istotnych zmian w rozmieszczeniu elektronów, ale tylko na zewnętrznych orbitach atomów. Na wewnętrznych orbitach poszczególnych atomów zmiany w rozmieszczeniu elektronów są praktycznie niezauważalne. Takie rozłożenie elektronów nie jest przypadkowe, ponieważ zewnętrzne elektrony mają znaczący wpływ na właściwości chemiczne cząsteczki.

Minimalna wartość energii potencjalnej otrzymana przez ten układ świadczy o trwałości połączenia atomów w cząsteczkę.

Przebieg tworzenia cząsteczki przez układ dwóch atomów można opisać następująco. Kiedy dochodzi do zbliżenia się atomów do siebie siły przyciągające w pierwszej kolejności rosną, później maleją, a na koniec przechodzą w siły odpychające.

Oddziaływania możemy podzielić na:

* Oddziaływania wewnątrzcząsteczkowe, nazywane także międzyatomowymi

Wiązania jonowe (elektropolarne, heteropolarne)

Wiązania kowalencyjne (atomowe, homeopolarne)

Wiązania koordynacyjne

* Oddziaływania międzycząsteczkowe
* Uniwersalne (niespecyficzne)
* Oddziaływania van der Waalsa
* Oddziaływania specyficzne
* Oddziaływania wodorowe

Rysunek

1. Oddziaływania wewnątrzcząsteczkowe
   1. Wiązania Jonowe

Wiązanie jonowe powstaje w wyniku przewagi sił elektrostatycznego przyciągania przeciwnie naładowanych jonów (kationów i anionów) lub grupami funkcyjnymi nad siłami odpychania jednego ładunku. W wiązaniach tego typu następuje przemieszczenie elektronów , aby do tego doszło jeden z pierwiastków musi być silniej elektroujemny, a drugi mniej. Następuje wtedy przeniesienie elektronu, w skutek czego powstaje kation pierwiastka o niskiej elektroujemności i anionu pierwiastka silnie elektroujemnego. Jony takie przyciągają się siłami elektrycznymi i tworzą silnie związaną cząsteczkę. O rozkładzie ładunku pomiędzy dwoma atomami mówi nam elektroujemność, którą zdefiniował Mullikena. Według niego elektroujemność atomów jest określana jako średnia arytmetyczna z sumy z powinowactwa elektronowego i pierwszej energii jonizacji.

Wydzielenie energii następuje w skutek przyjmowania elektronu. Największą elektroujemność mają chlorowce , którym brakuje do oktetu jednego elektronu. Dzieje się tak podczas dołączania do nich elektronu. Natomiast najmniejszą elektroujemność wykazują atomu z układu okresowego grupy I, czyli w atomach metali alkalicznych. Najczęściej jednak powstają wiązania jonowe, kiedy na skutek przejścia elektronu do atomu o mniejszej elektroujemności do atomu o większej elektroujemności tworzą się jednocześnie w pozostałych jonach zapełnione powłoki elektronowe.

Typowymi związkami jonowymi są połączenia atomów z

Można jeszcze przykład

* 1. Wiązania kowalencyjne

Wiązania kowalencyjne inaczej zwane wiązania atomowe powstają przede wszystkim w cząsteczkach homodwujądrowych, czyli powstaje pomiędzy identycznymi atomami jednego pierwiastka. Wiązania takie tworzą się w wyniku uwspólniania elektronów pochodzących od obu atomów. Jest to dosyć oczywiste, ponieważ trudno jest sobie wyobrazić aby cząsteczki homojądrowe powstawały w rezultacie przeniesienia elektronów z jednego atomu na drugi o identycznej elektroujemności. Różnica elektroujemności pomiędzy pierwiastkami tworzącymi wiązanie wynosi zero. Poprzez uwspólnianie elektronów atom może uzyskać oktet walencyjny. W takim przypadku oba atomy są partnerami równorzędnymi

Wiązania Kowalencyjne możemy podzielić na dwie grupy:

* Niespolaryzowane – w wyniku takiego wiązania powstaje para tworzona przez dwa jednakowe pierwiastki. Obydwa atomy są tak samo elektroujemne i każdy z nich z równą siłą przyciąga pary elektronów.
* Spolaryzowane- w wyniku takiego wiązania powstaje para lub kilka par elektronowych, które są przesunięte w kierunku bardziej elektroujemnego atomu. W takim przypadku jeden z atomów jest dodatnio naładowany, a drugi ujemnie.

Podział wiązań kowalencyjnych ze względu na charakter wiązania:

* Pojedyncze
* Podwójne
* Potrójne

Rola wademecum

* 1. Wiązania koordynacyjne

Trzecim typem wiązań wewnątrzcząsteczkowych jest wiązanie koordynacyjne. Czasami jest traktowane jako szczególny przypadek wiązania kowalencyjnego. Jednak różni się ono sposobem powstawania. Istota tego wiązania jest, że do powstania tego wiązania nie potrzebne są elektrony dostarczane przez dwa atomy, po jednym przez każdy z nich. Para elektronów wiążąca atomy pochodzi od uwspólniania jednego z atomów tworzących wiązanie zwanym donorem. Drugi atom zwany akceptorem, uzupełnia własną powłokę walencyjną elektronami donora.

1. Odziaływania międzycząsteczkowe

3.1

**4. Narzędzia RNA - RNA**

**4.1 AccessFold**

Narzędzie to przewiduje oddziaływania RNA – RNA. AccessFold przewiduje tylko dwucząsteczkowe helisy takie jak pary zasad złożone z jednego nukleotydu … , gdzie helisy są przerwane przez niesparowane nukleotydy w pętli wewnętrznej lub wypukłości.

|  |  |
| --- | --- |
| Sposób dostępu: | Program instalowalny |
| Typ oprogramowania: | Pakiet |
| Jak jest obsługiwany: | Interfejs wiersza poleceń, interfejs graficzny |
| Ograniczenia w użyciu: | żadne |
| System operacyjny: | Unix/Linux |
| Znajomość obsługi komputera: | zaawansowane |
| Stabilność: | Stabilny |
|  |  |

**4.2 Comparative prediction algorithm for small RNA targets CopraRNA**

|  |  |
| --- | --- |
| Sposób dostępu: | Aplikacja internetowa |
| Ograniczenia w użyciu: | żadne |
| Znajomość obsługi komputera: | Podstawowa |
| Stabilność: | Stabilny |
|  |  |

Specyfikacje:

CopraRNA jest dostępna jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę <http://rna.informatik.uni-freiburg.de/CopraRNA/Input.jsp>. Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji skorzystać z tego narzędzia.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne.

**4.3 IntraRNA**

|  |  |
| --- | --- |
| Sposób dostępu: | Aplikacja internetowa |
| Ograniczenia w użyciu: | żadne |
| Znajomość obsługi komputera: | Podstawowa |
| Stabilność: | Stabilny |

**4.4 Intermolecular RNA (BLAT-like) Interaction Search IRBIS**

|  |  |
| --- | --- |
| Sposób dostępu: | Program instalowalny |
| Typ oprogramowania: | Pakiet |
| Jak jest obsługiwany: | Interfejs wiersza poleceń |
| Ograniczenia w użyciu: | żadne |
| System operacyjny: | Unix/Linux |
| Licencja: | GNU General Public License w wersji 2.0 |
| Znajomość obsługi komputera: | zaawansowane |
| Wersja | IRBIS wersja 3.0 |
| Stabilność: | Stabilny |
|  |  |

**4.5 NPInter**

|  |  |
| --- | --- |
| Sposób dostępu: | Program instalowalny, aplikacja internetowa |
| Ograniczenia w użyciu: | żadne |
| Wersja: | 3.0 |
| Stabilność: | Stabilny |
|  |  |

**4.6 RILogo**

|  |  |
| --- | --- |
| Sposób dostępu: | Program instalowalny, aplikacja internetowa |
| Typ oprogramowania: | Pakiet |
| Jak jest obsługiwany: | Interfejs wiersza poleceń |
| Ograniczenia w użyciu: | żadne |
| Dane wejściowe: | Sekwencja |
| Format wejściowy: | Stockholm, CLUSTAL, FASTA |
| Język programowania: | C++ |
| Licencja: | GNU General Public License w wersji 2.0 |
| System operacyjny: | Unix/Linux |
| Znajomość obsługi komputera: | zaawansowane |
| Stabilność: | Stabilny |
|  |  |

**4.7 RNAplex**

|  |  |
| --- | --- |
| Sposób dostępu: | Program instalowalny |
| Typ oprogramowania: | Pakiet |
| Jak jest obsługiwany: | Interfejs wiersza poleceń |
| Ograniczenia w użyciu: | żadne |
| System operacyjny: | Unix/Linux |
| Znajomość obsługi komputera: | zaawansowane |
| Stabilność: | Stabilny |
|  |  |

**4.8 ViennaRNA**

|  |  |
| --- | --- |
| Sposób dostępu: | Program instalowalny, aplikacja internetowa |
| Typ oprogramowania: | Pakiet |
| Jak jest obsługiwany: | Interfejs wiersza poleceń |
| Ograniczenia w użyciu: | żadne |
| System operacyjny: | Unix/Linux |
| Znajomość obsługi komputera: | zaawansowane |
| Wersja: | ViennaRNA wersji 2.1.9 |
| Stabilność: | Stabilny |
| Pobierz URL: | http://www.tbi.univie.ac.at/RNA/ |