

# Medmolekulske interakcije

HELLO!

# Kako se lepijo površine med seboj?

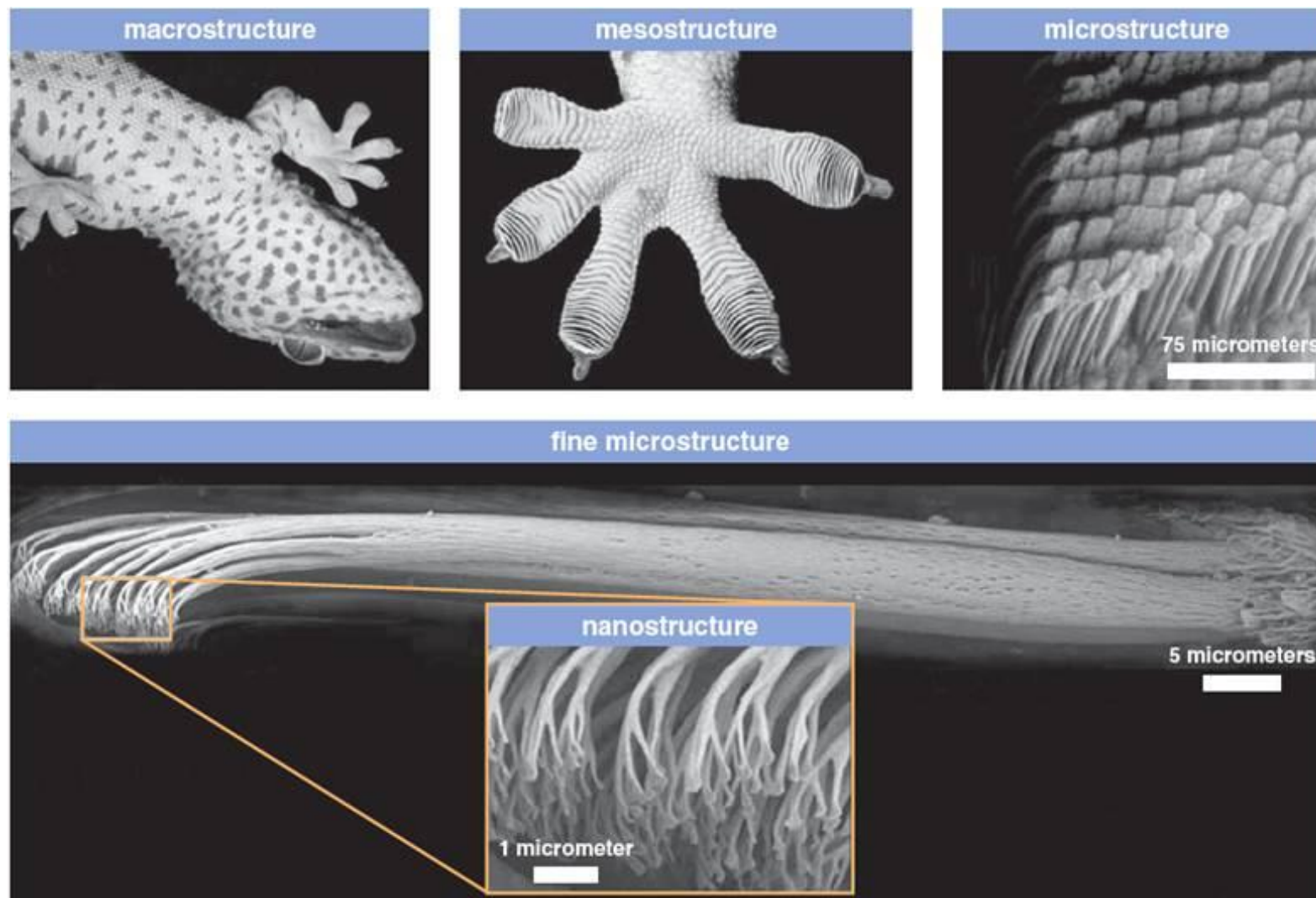
s povečanjem  
stične površine



površina Post-it lepila

# Kako se lepijo površine med seboj?

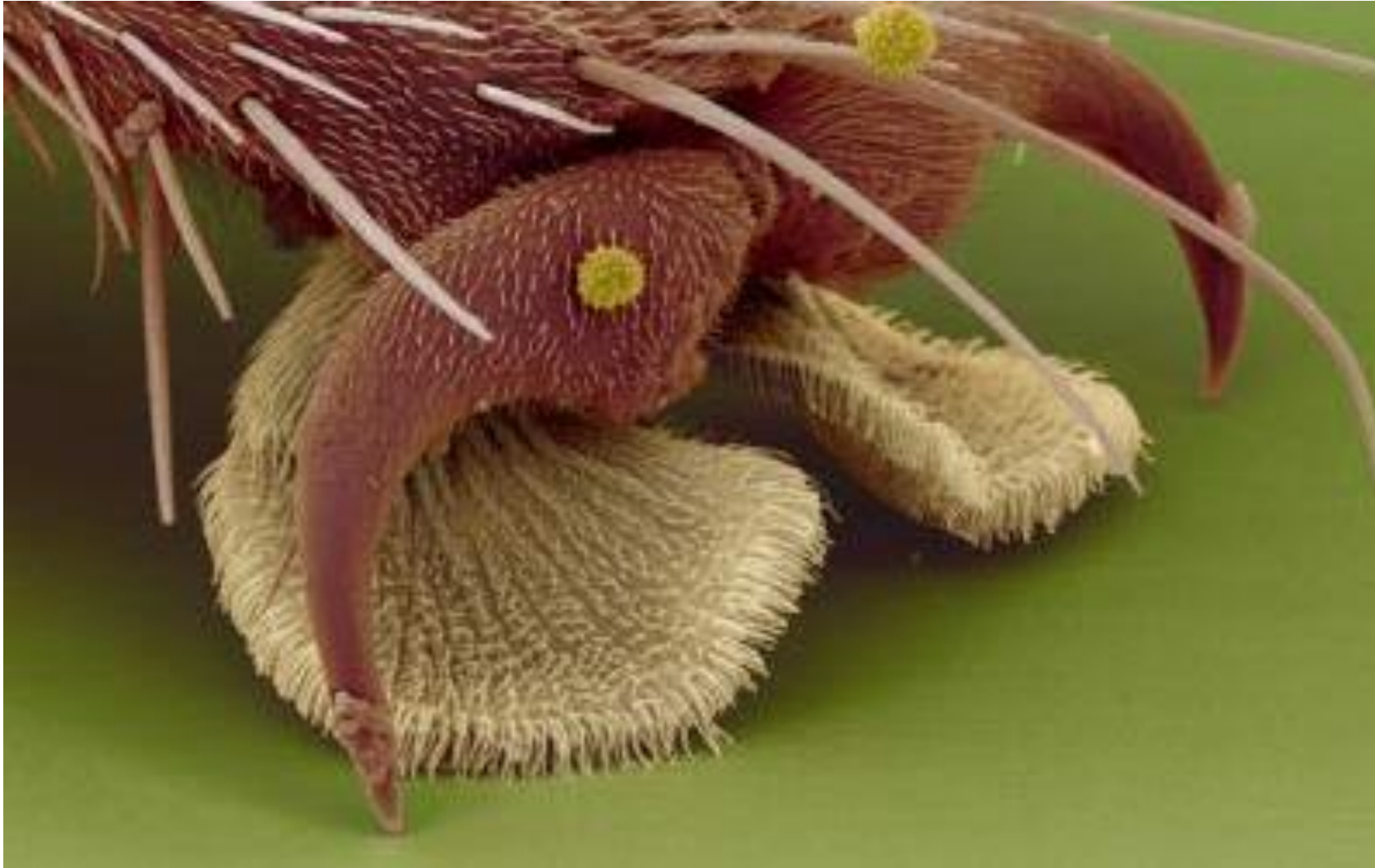
s povečanjem  
stične površine



okončina gecka

# Kako se lepijo površine med seboj?

preko izločanja  
smol, sladkorjev, ...



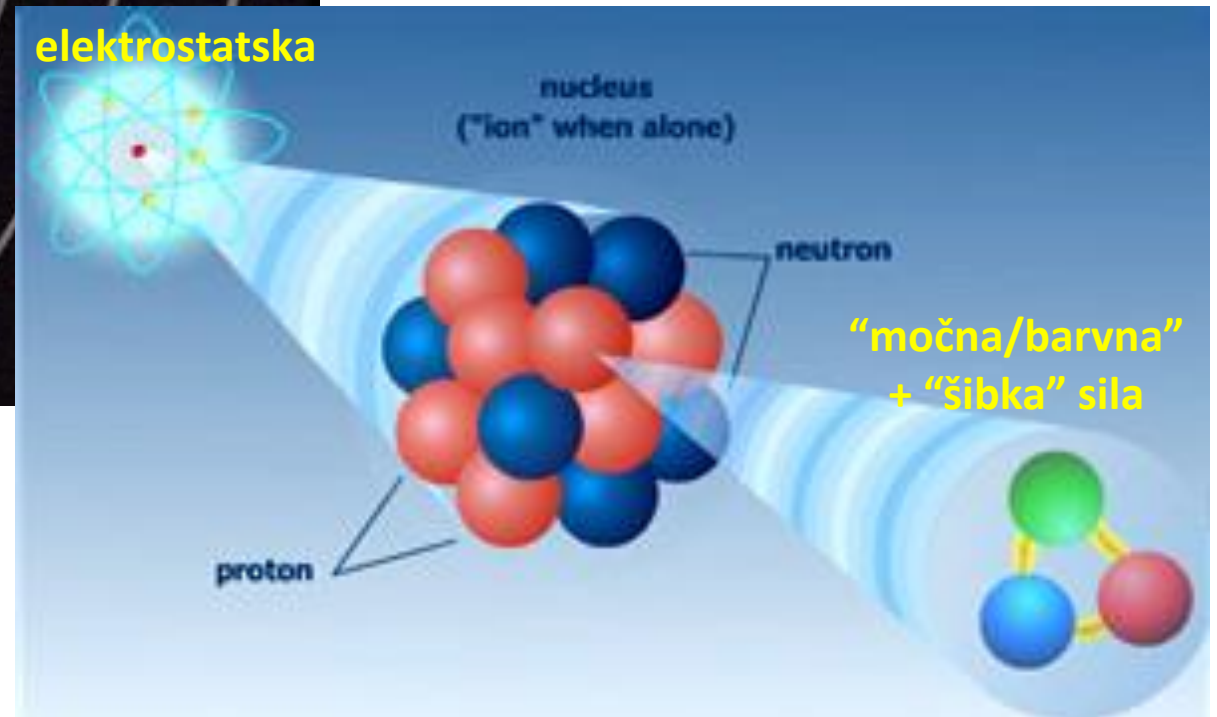
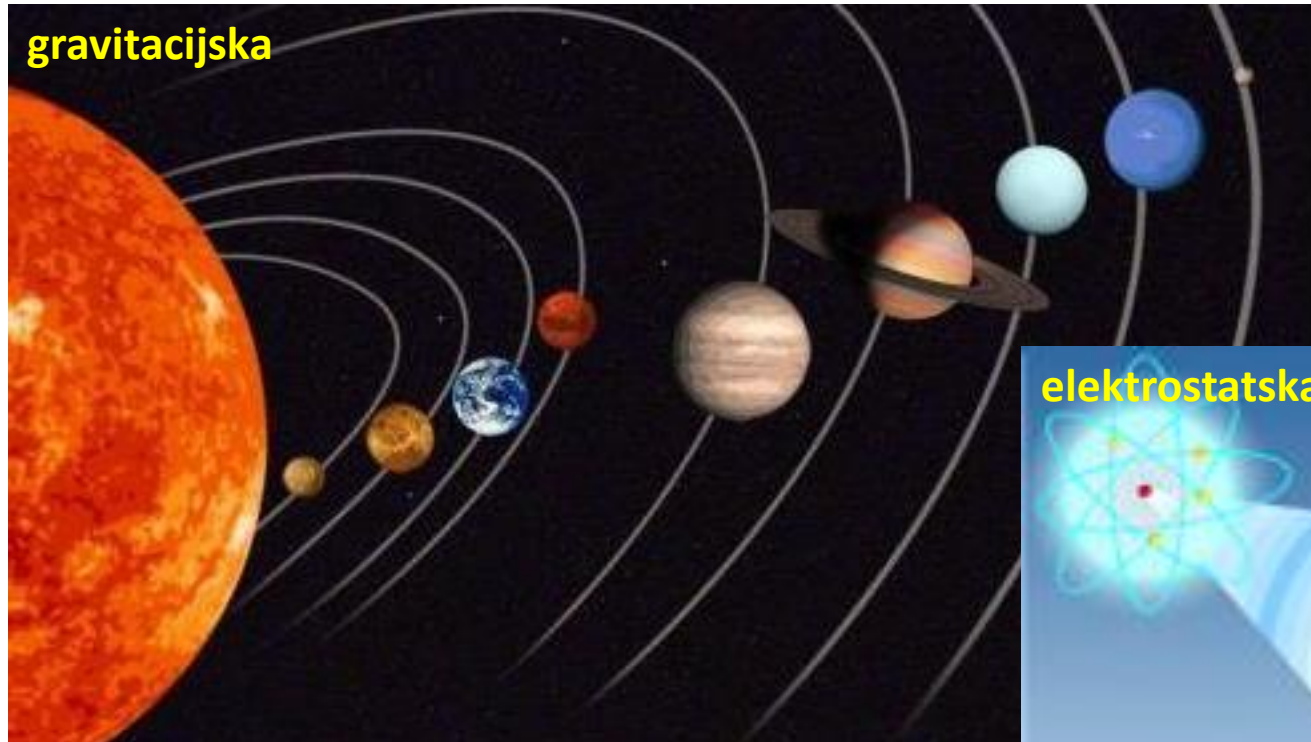
okročina muhe



A close-up photograph of a stainless steel pot filled with water that is vigorously boiling. Numerous bubbles are visible on the surface of the water, and a plume of white steam is rising from the pot. The pot is set on a white surface, likely a stovetop.

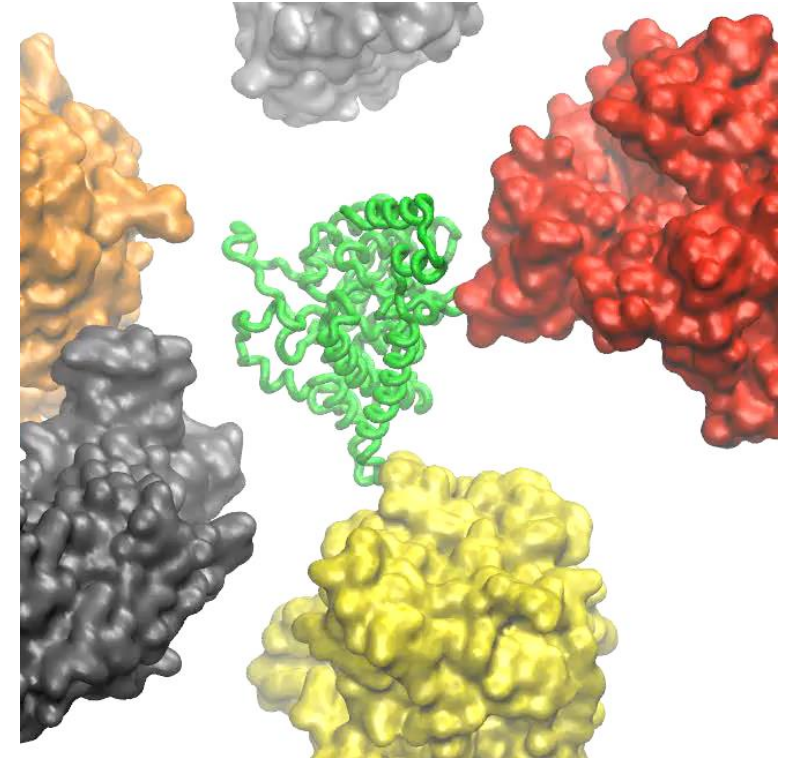
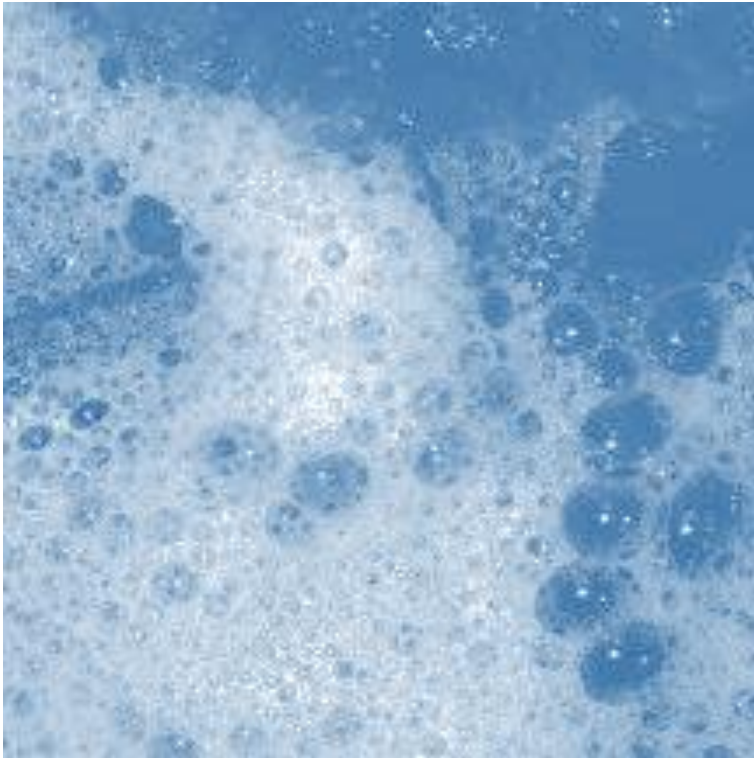
# Medmolekulske interakcije

# Osnovne sile





V molekularnem svetu prevladujejo interakcije na osnovi **elektrostatskih sil**.



# Elektroni: nosilci elektrostatskih interakcij

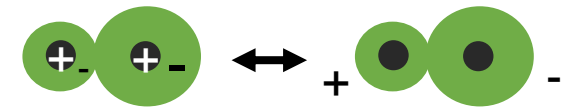
- **Elektroni** imajo **negativen naboj**.



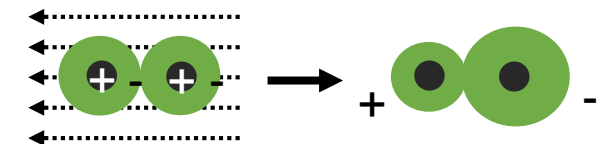
- So zelo lahki delci, zato so porazdeljeni okoli mnogo težjih jeder s pozitivnim nabojem. Elektroni tvorijo **elektronske oblake/orbitale**.



- 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**.



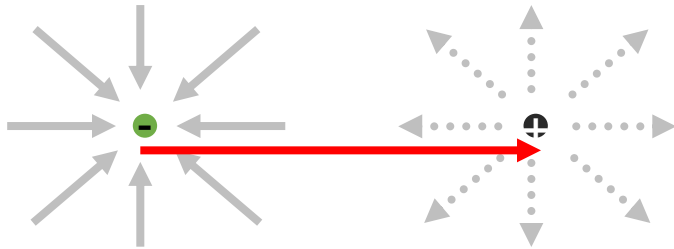
- Težišča nabojev se razmaknejo tudi pod vplivom zunanjih električnih polj. Tako nastanejo **inducirani električni dipoli**, njihova jakost je odvisna od polarizabilnosti molekule ( $\alpha$ ).





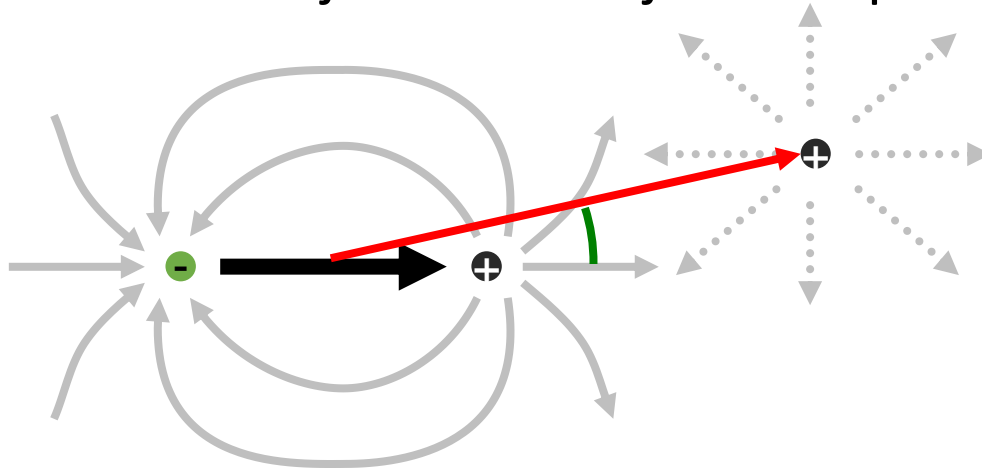
# Kako daleč sežejo interakcije?

- Električna (Coulombova) interakcija med dvema nabojema



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

- Električna interakcija med nabojem in dipolom

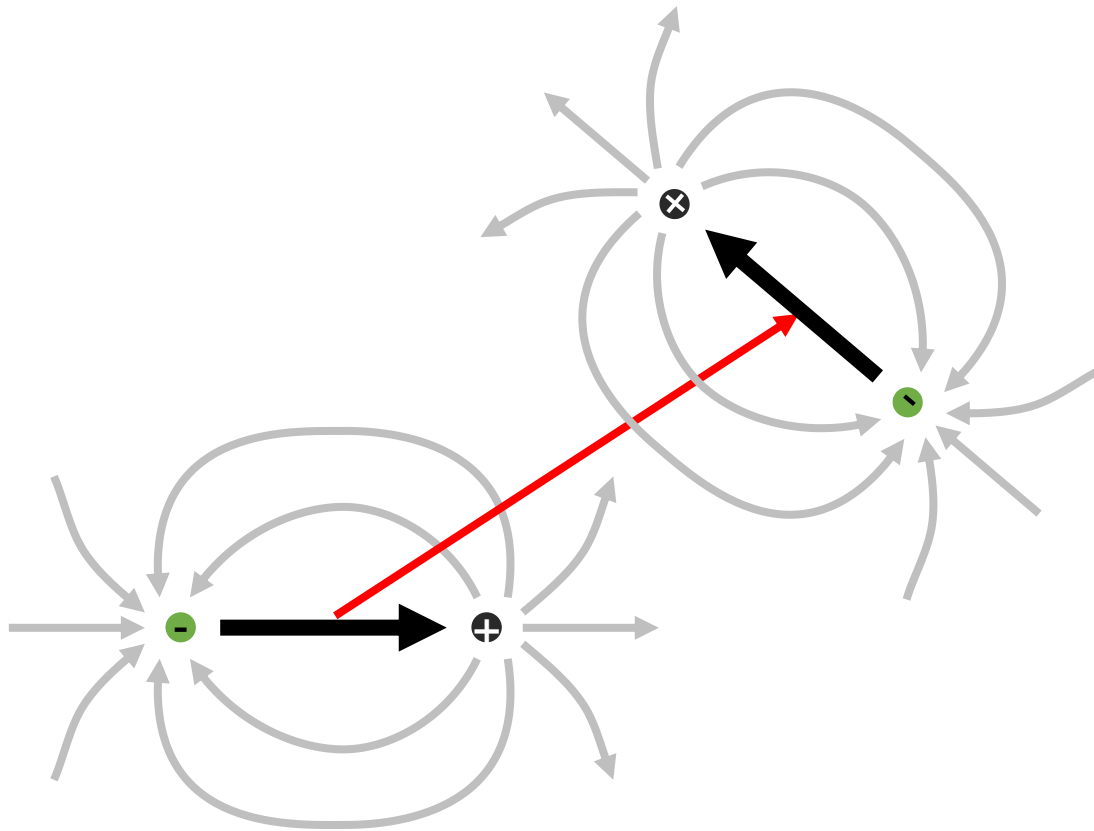


$$W \propto e_1 u_2 \frac{\cos(\varphi)}{r^2}$$

$$u_2 = e_2 d$$

# Kako daleč sežejo interakcije?

- Interakcija med dvema dipoloma

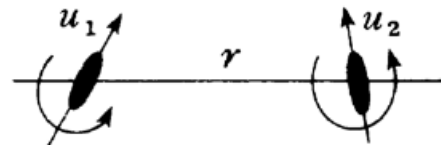


$$W \propto u_1 u_2 \frac{\cos \dots}{r^3}$$

# Van der Waalsove interakcije

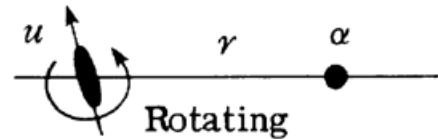
- Dipolne interakcije na osnovi polariziranih elektronskih oblakov

- Dva dipola



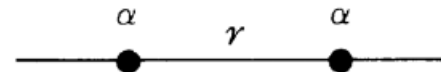
$$W \propto \frac{1}{r^6 kT}$$

- Dipol + induciran dipol



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

- Dva inducirana dipola



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

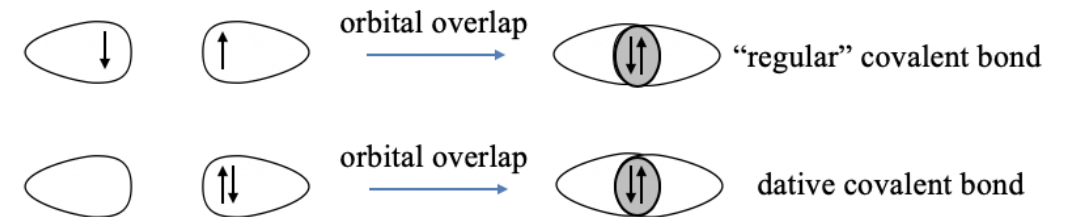
- Ne pozabimo vedno prisotnega odboja pri majhnih razdaljah  
(*izključitveno načelo*: dva elektrona ne moreta biti na istem mestu ob istem času)



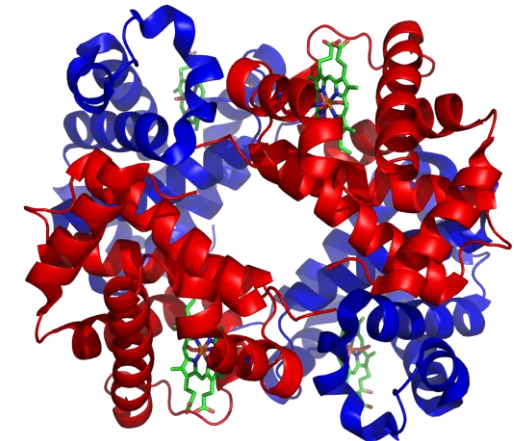
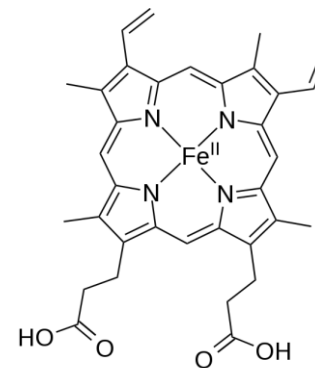
# Kvantno-mehanske interakcije

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

- **Kovalentna in koordinativna vez**  
co-valence; atoma si delita elektronski par



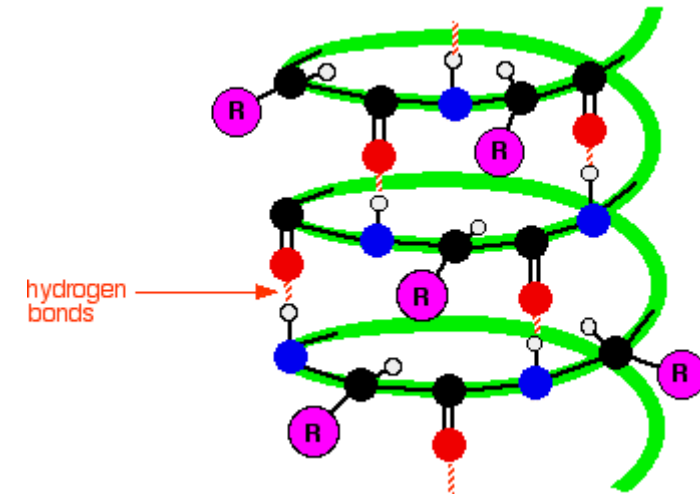
hemoglobin



# Kvantno-mehanske interakcije

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

- **Kovalentna in koordinativna vez**  
co-valence; atoma si delita elektronski par
- **Vodikova vez**
  - H tvori vez med dvema paroma elektronov
  - pogoj za to je elektronegativnost donorja protona
  - struktura proteinov, DNA, polisaharidov, ...



# Kako močne so posamezne vezi?

- V molekularnem svetu primerjamo energije interakcij s termično energijo:

pri  $T = 310\text{ K}$  ( $37^\circ\text{C}$ ) je  $kT = 0.0267\text{ eV}$

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



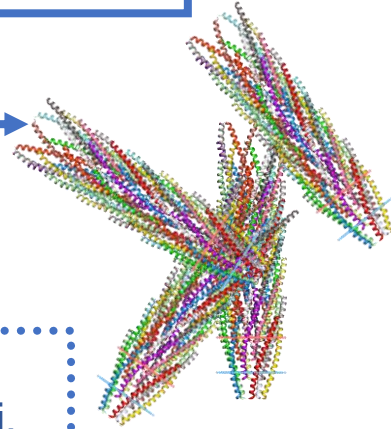


# Poglejmo v disperzijo delcev



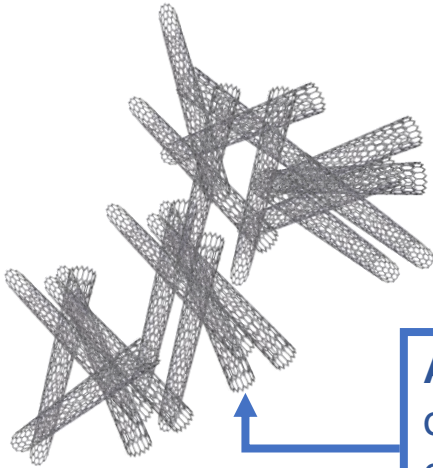
**Proteinski agregati:**

Proteini v virusnih plaščih ali pri amiloidozah



**Pufer:**

fosfatni in nitratni anioni,  
kalijeve in natrijeve kationi

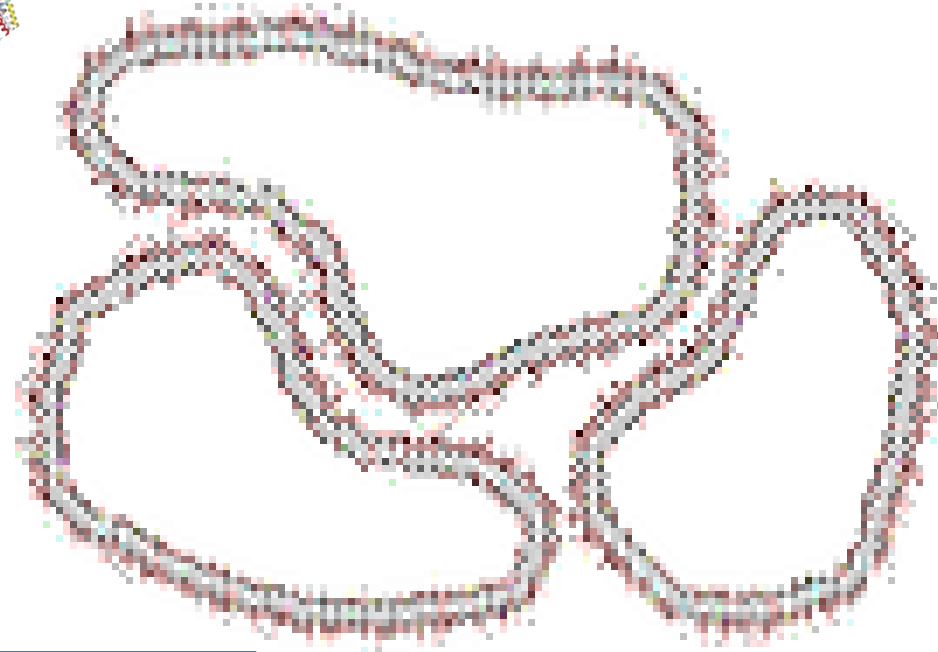


**Agregati nanodelcev:**

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

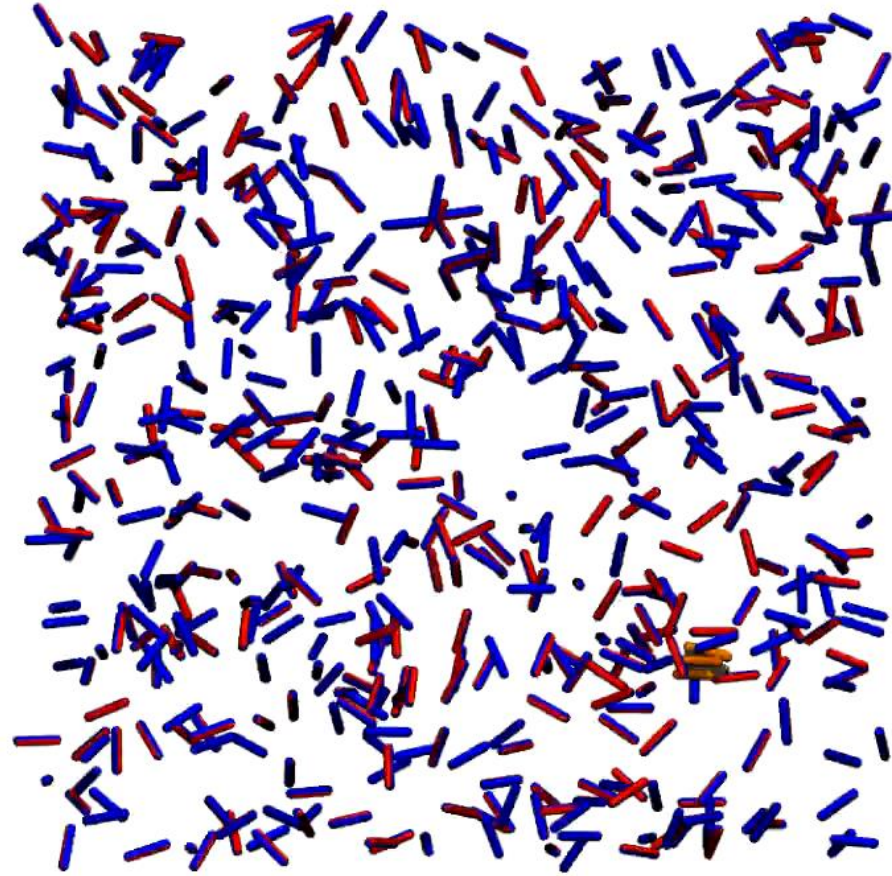
**Skupki lipidnih vesiklov:**

Zwitterionski fosfolipidi,  
disociirani fosfolipidi,  
disociirani glikosfingolipidi



# Agregacija proteinov v fibrile

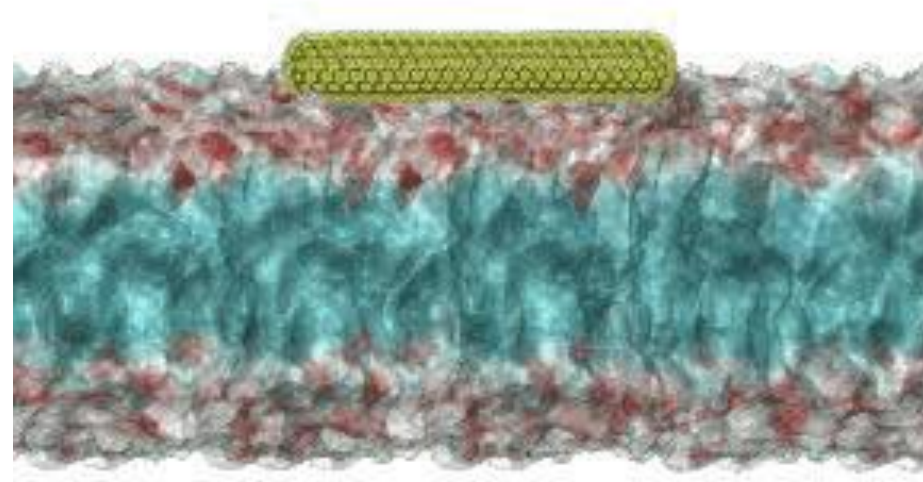
Množica  
patofizioloških problemov  
povezanih z agregacijo





# Vdor ogljikove nanocevke v membrano

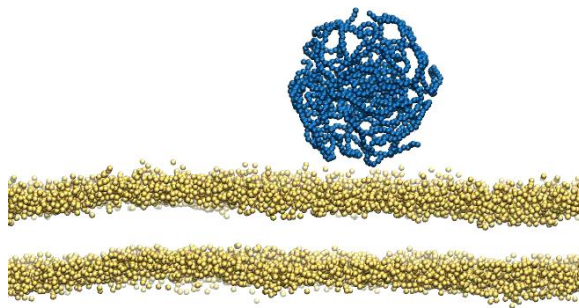
**Množica  
novih nanomaterialov z  
nepredvidljivimi vplivi**



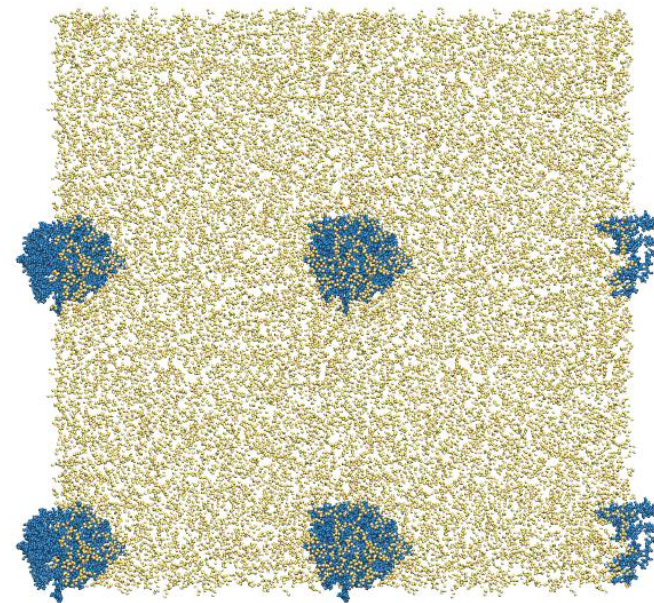
# “Raztapljanje” polimernega nanodelca v membrani

Degradacija polimernih odpadkov

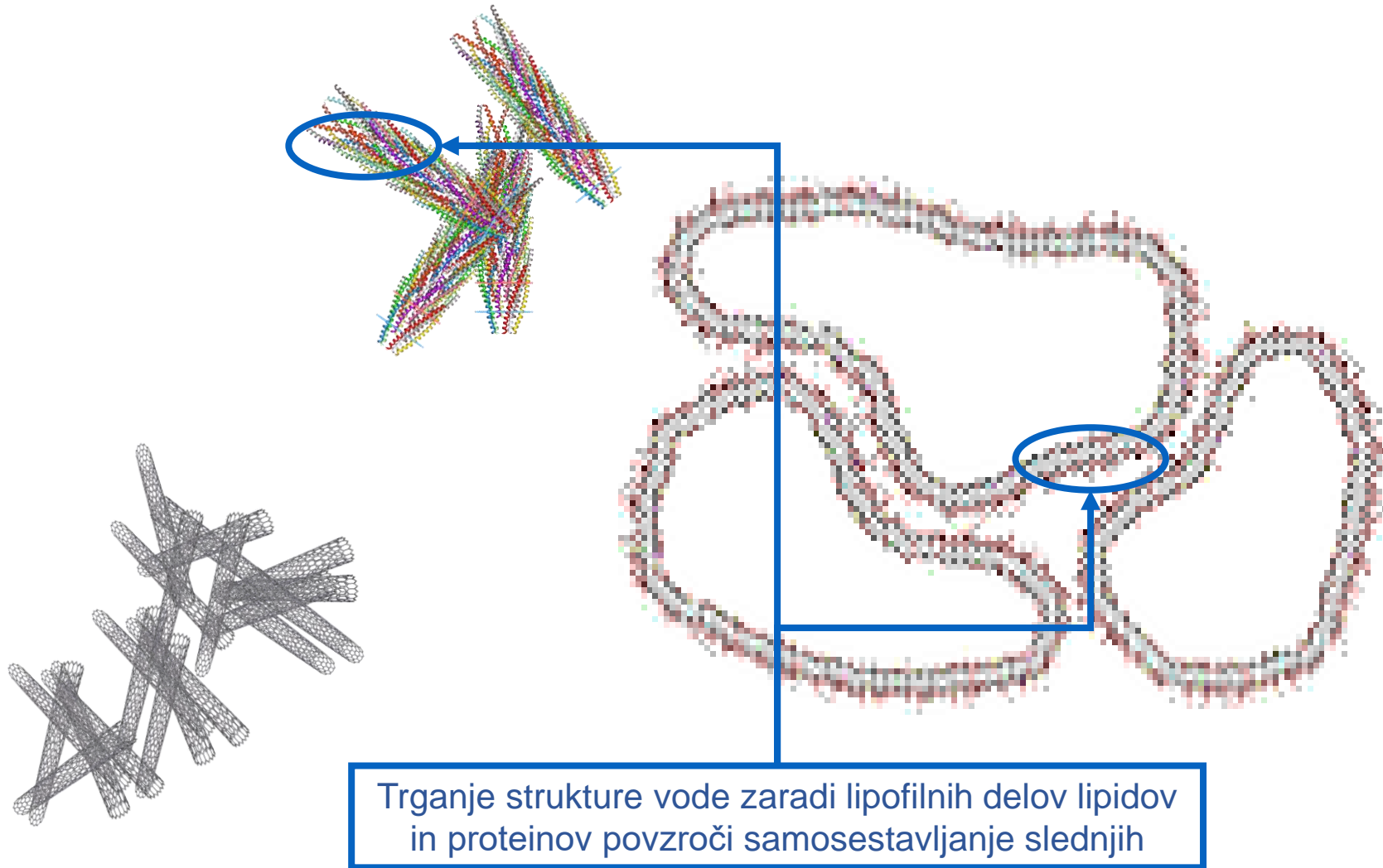
čas: 1  $\mu$ s



čas: 10  $\mu$ s

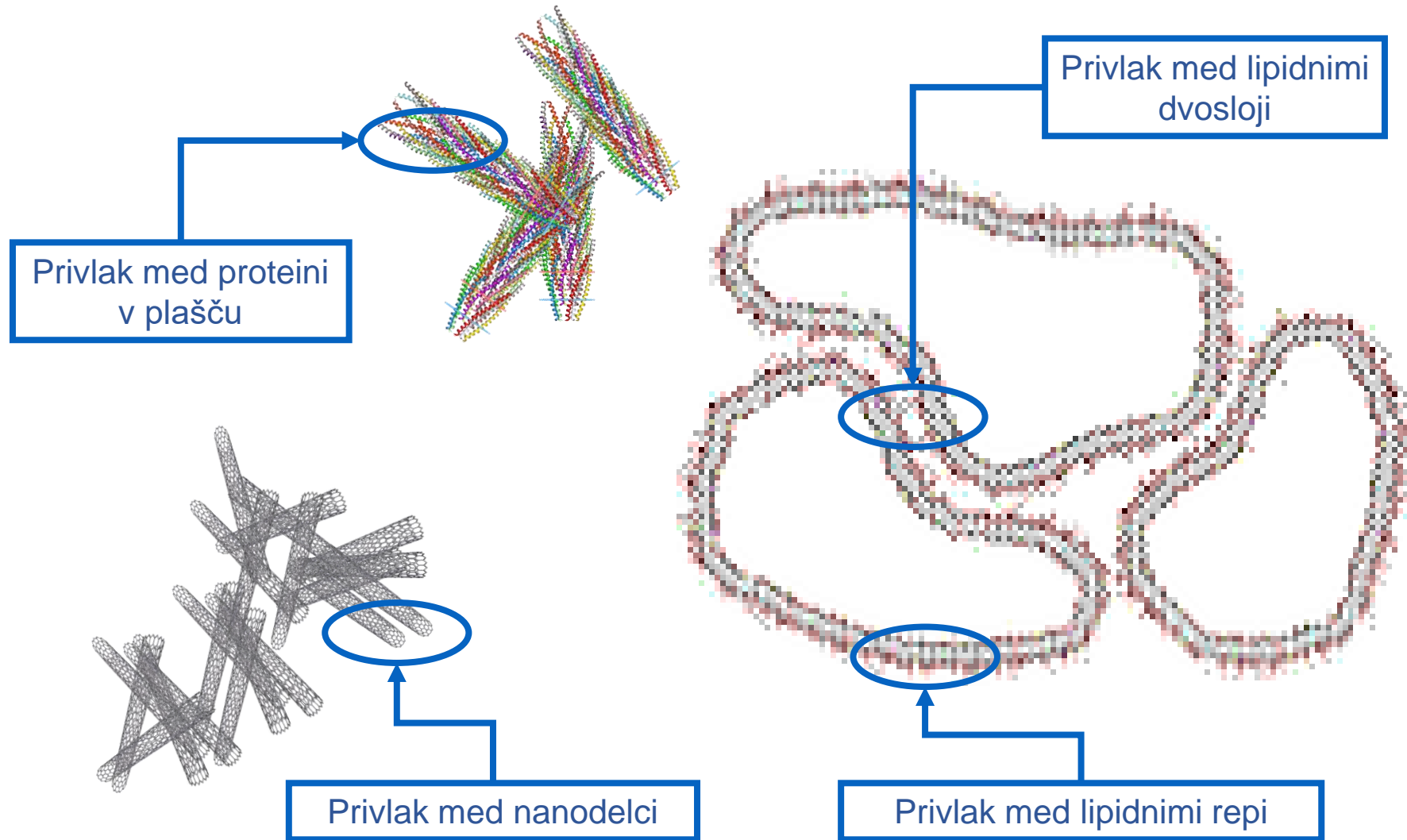


# Hidrofobna “interakcija” sestavi

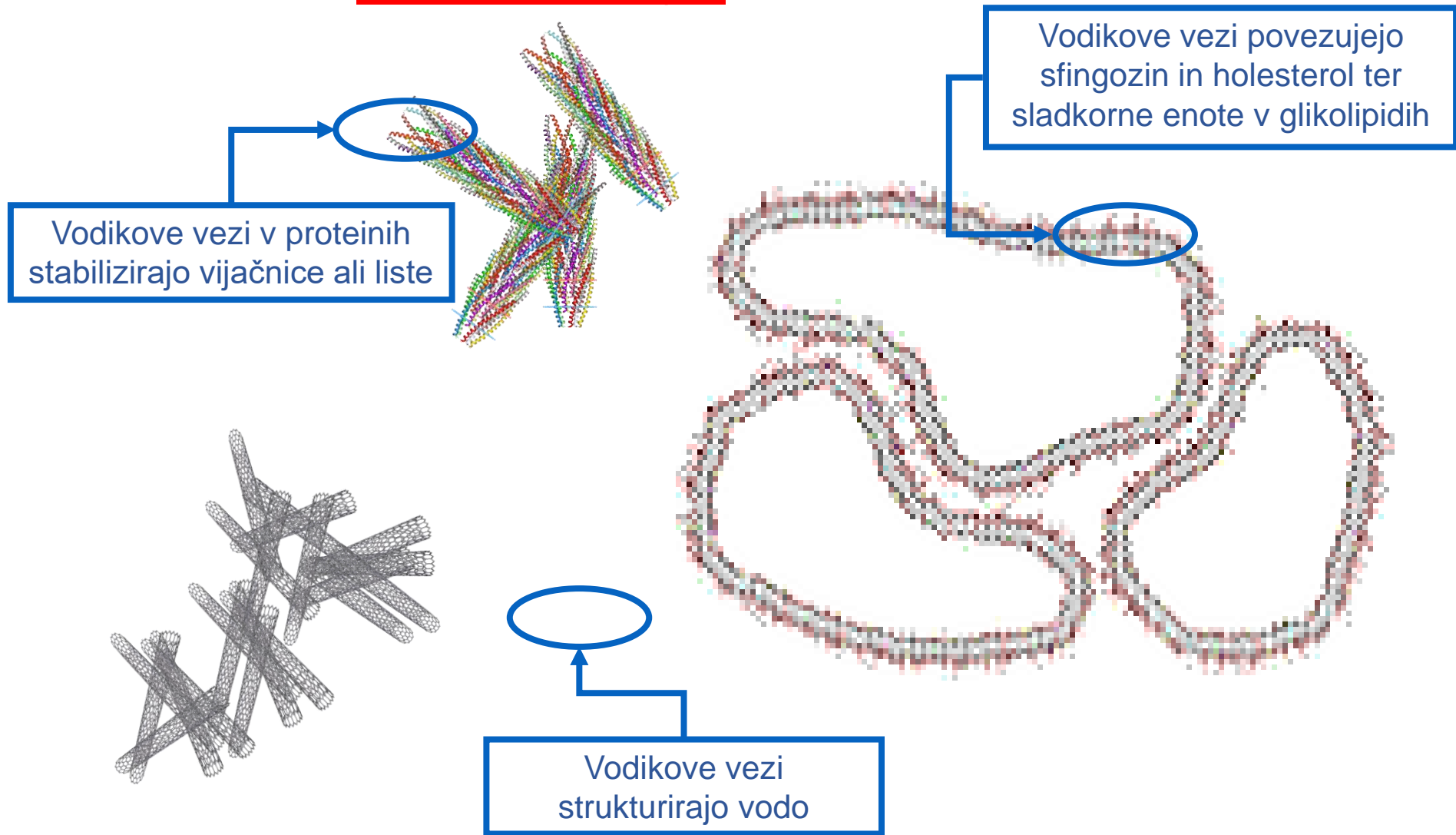




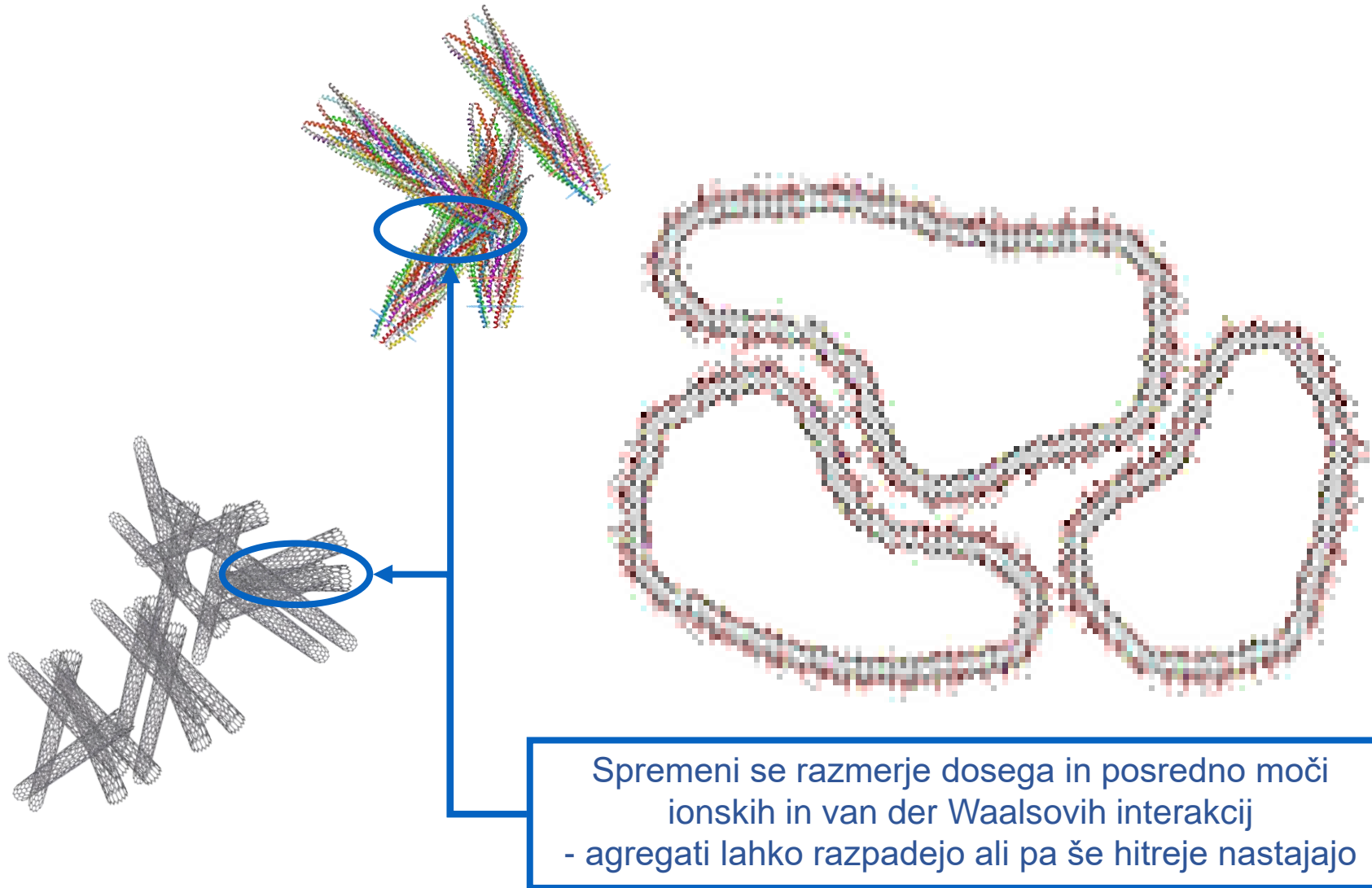
# Van der Waalsove interakcije agregirajo



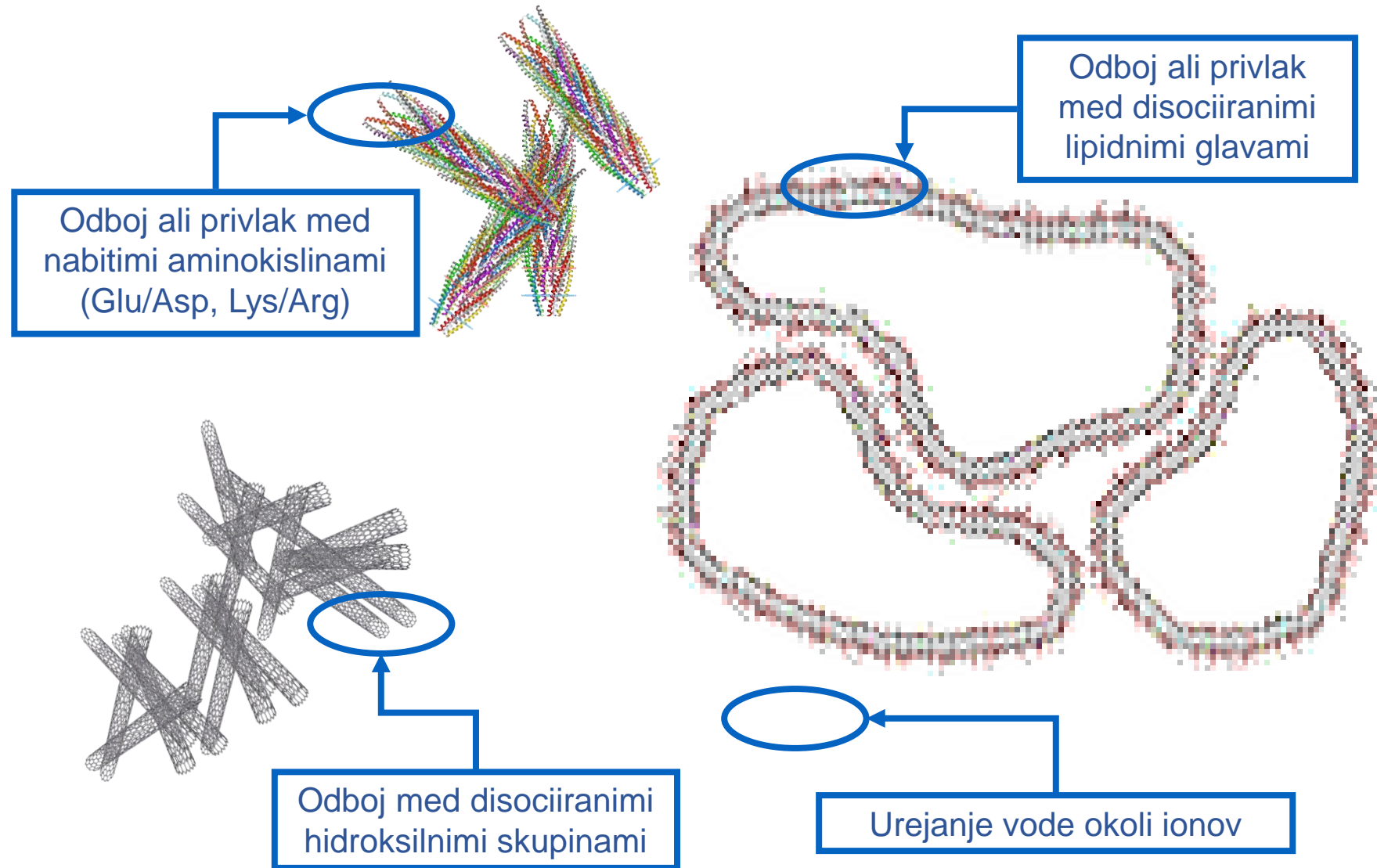
# Vodikove vezi stabilizirajo



# Ioni v raztopini senčijo interakcije dolgega dosega

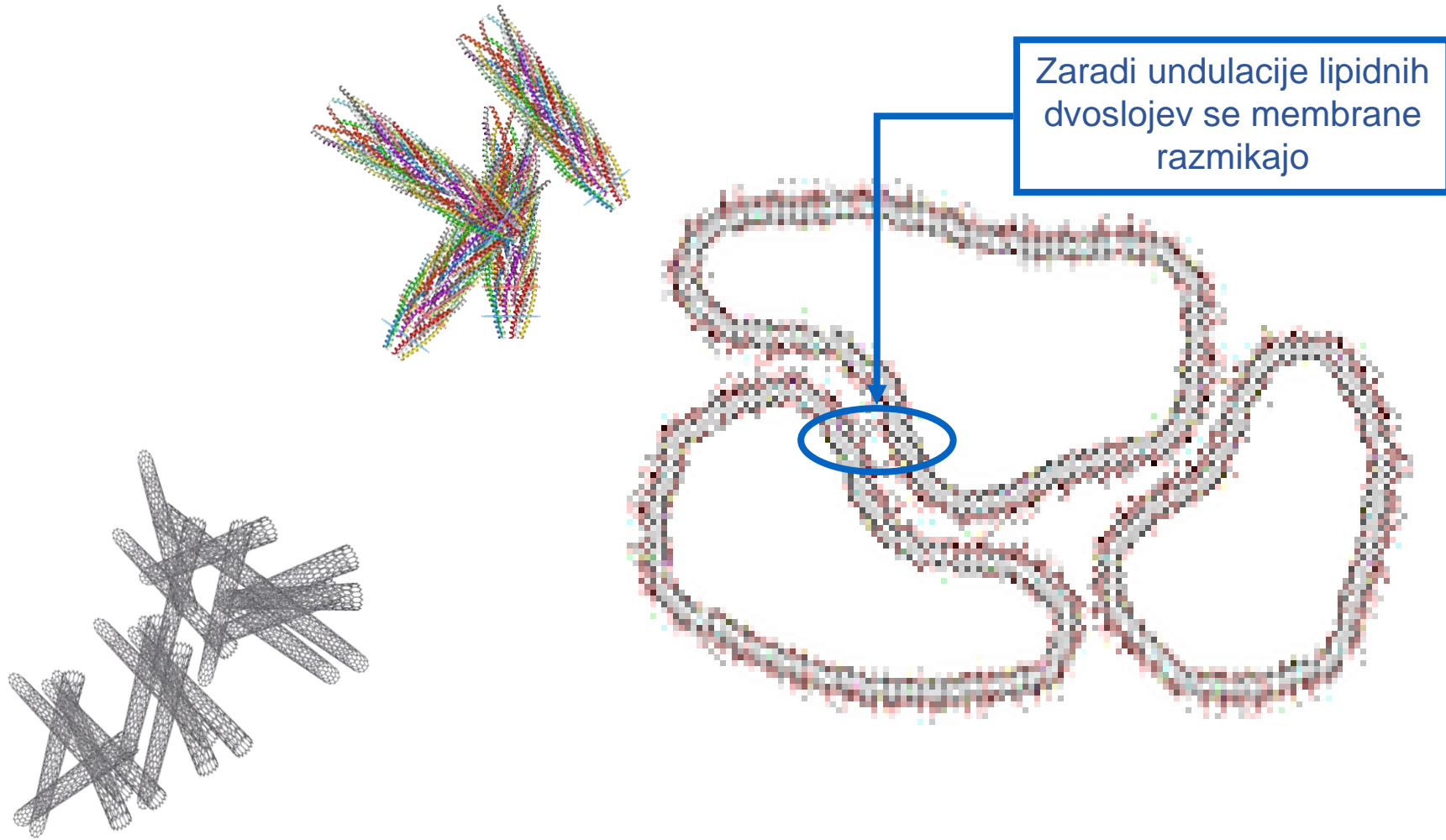


# Ionske in dipolne interakcije prestrukturirajo





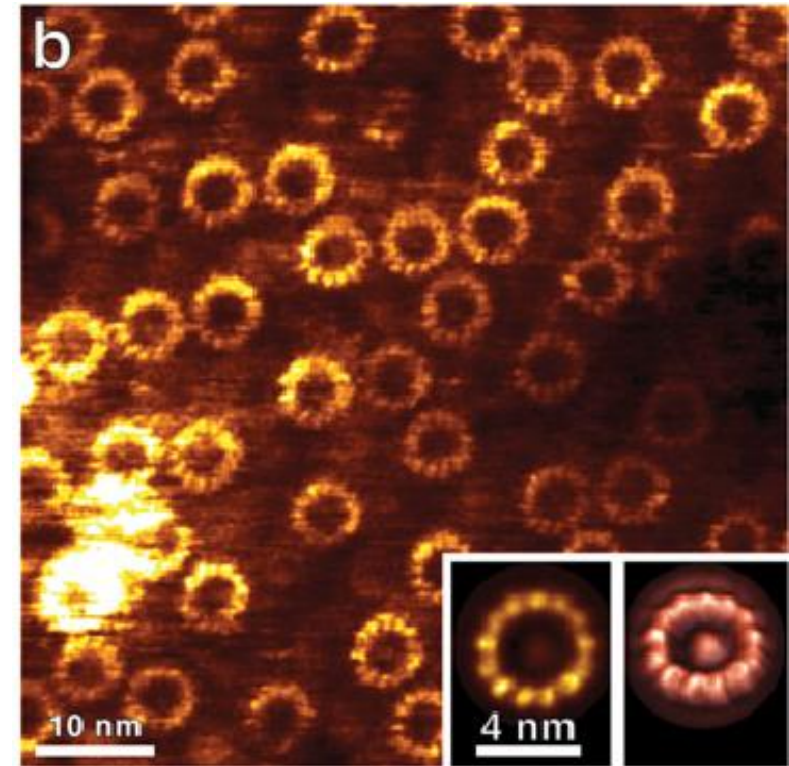
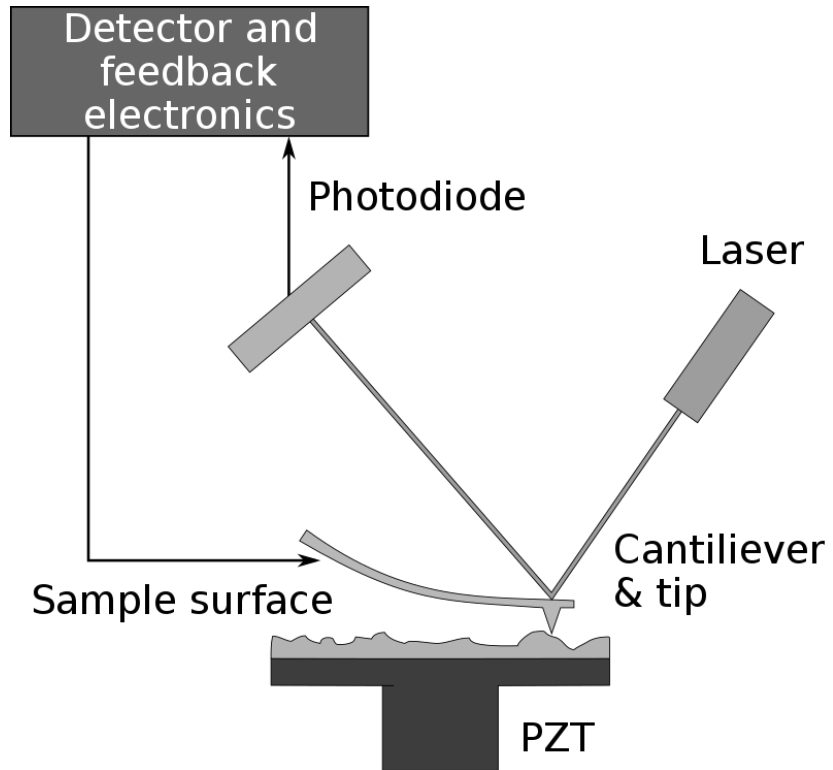
# Fluktuacijske sile razmikajo



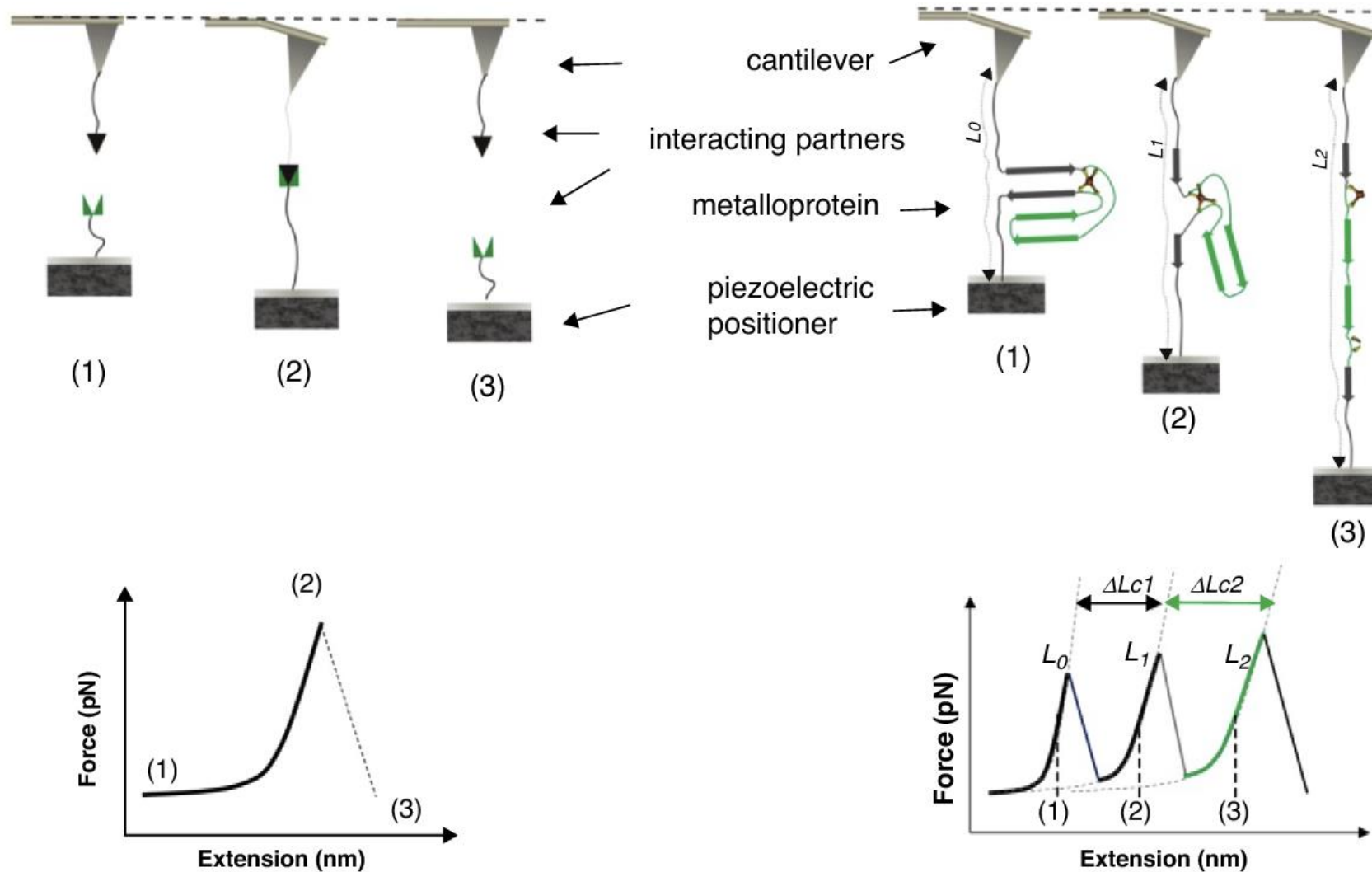


# Kako bi pomerili sile med molekulami?

# Mikroskopija na atomsko silo (AFM) - slepi s paličico vidi

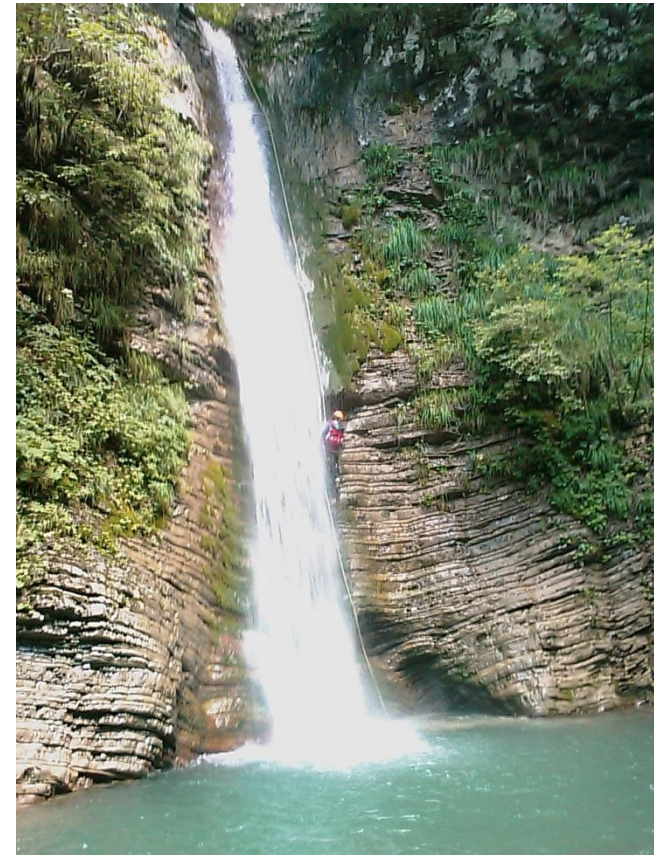
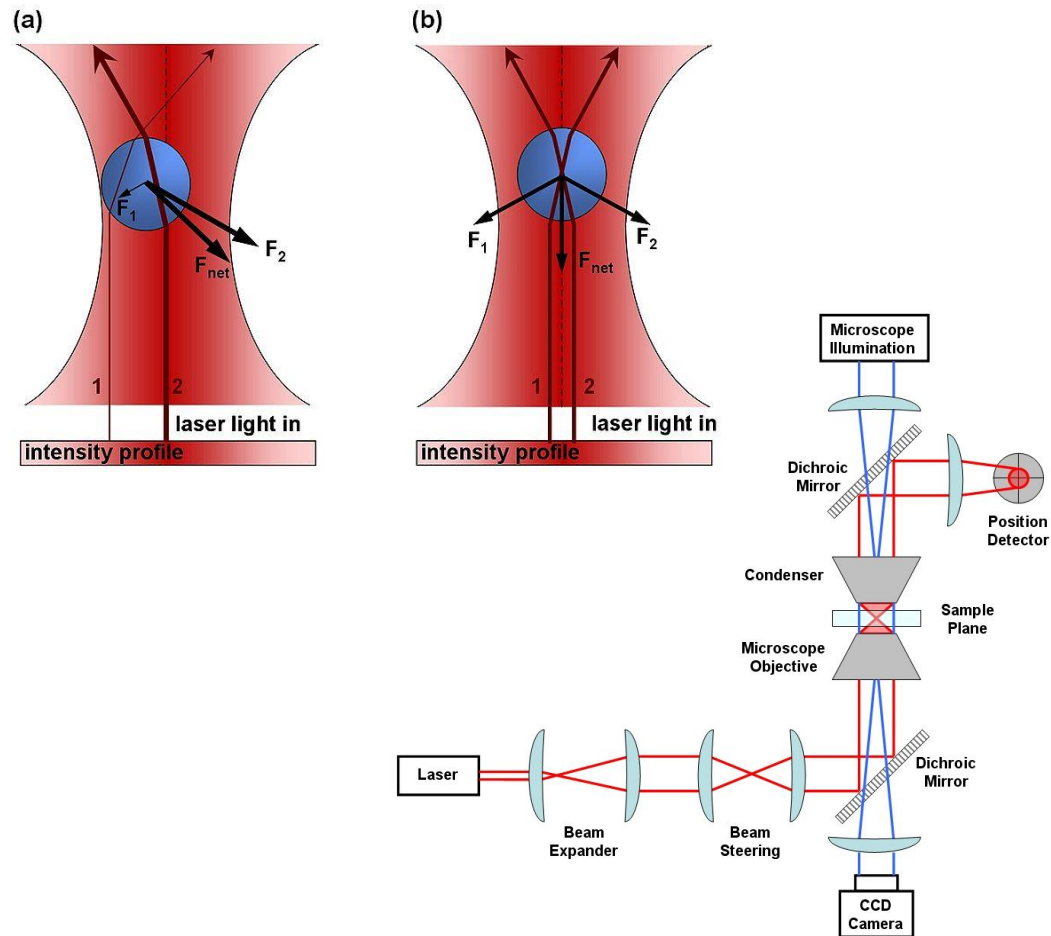


# Kakšne so sile vezi med proteini in v proteinih?





# Optična pinceta - slap nas ne pusti iz stržena



# Kako vlečejo molekularni motorji?

miozin, aktin, ATP

