

Medmolekulske interakcije

HELLO!

Kako se lepijo površine med seboj?

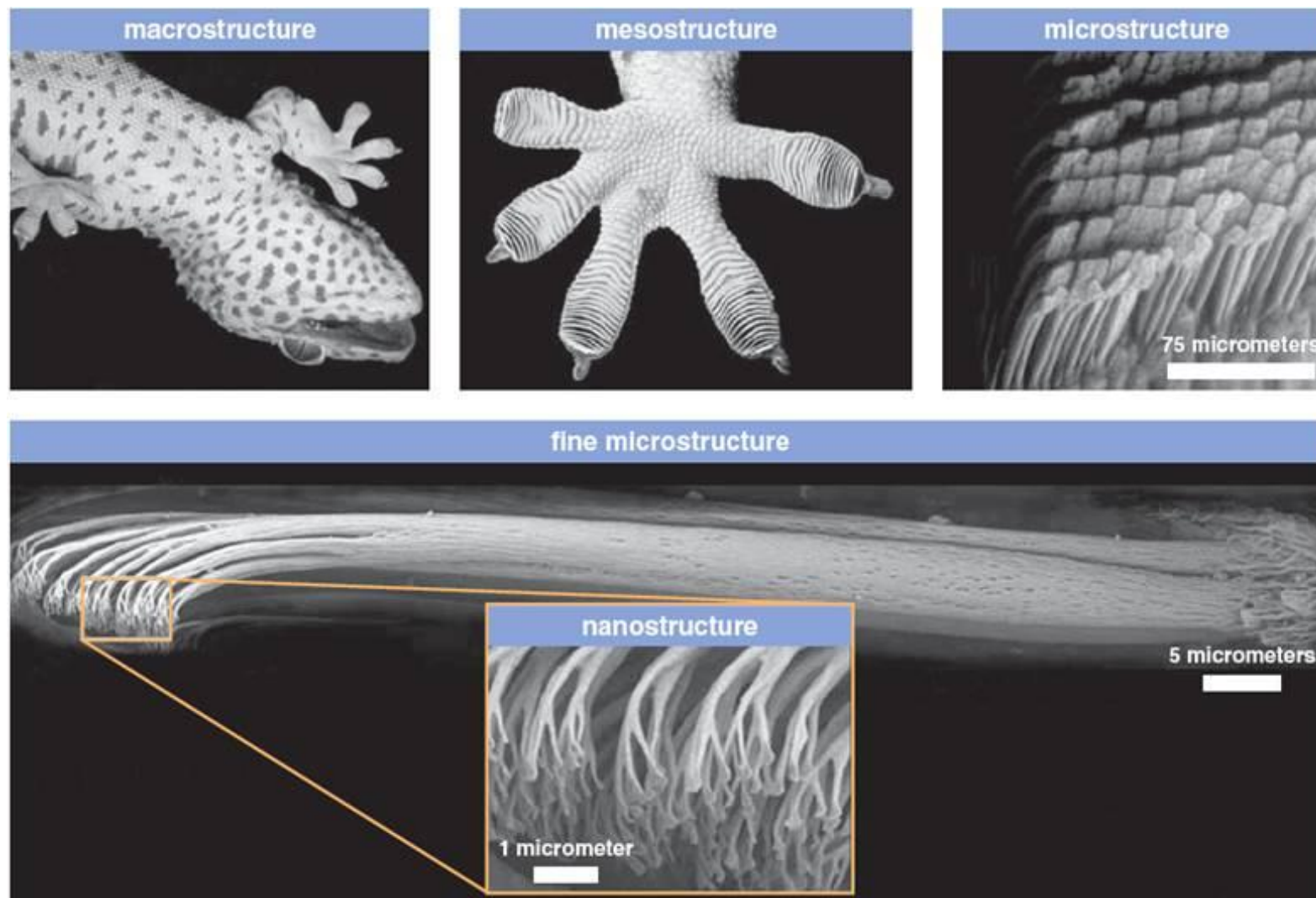
s povečanjem
stične površine



površina Post-it lepila

Kako se lepijo površine med seboj?

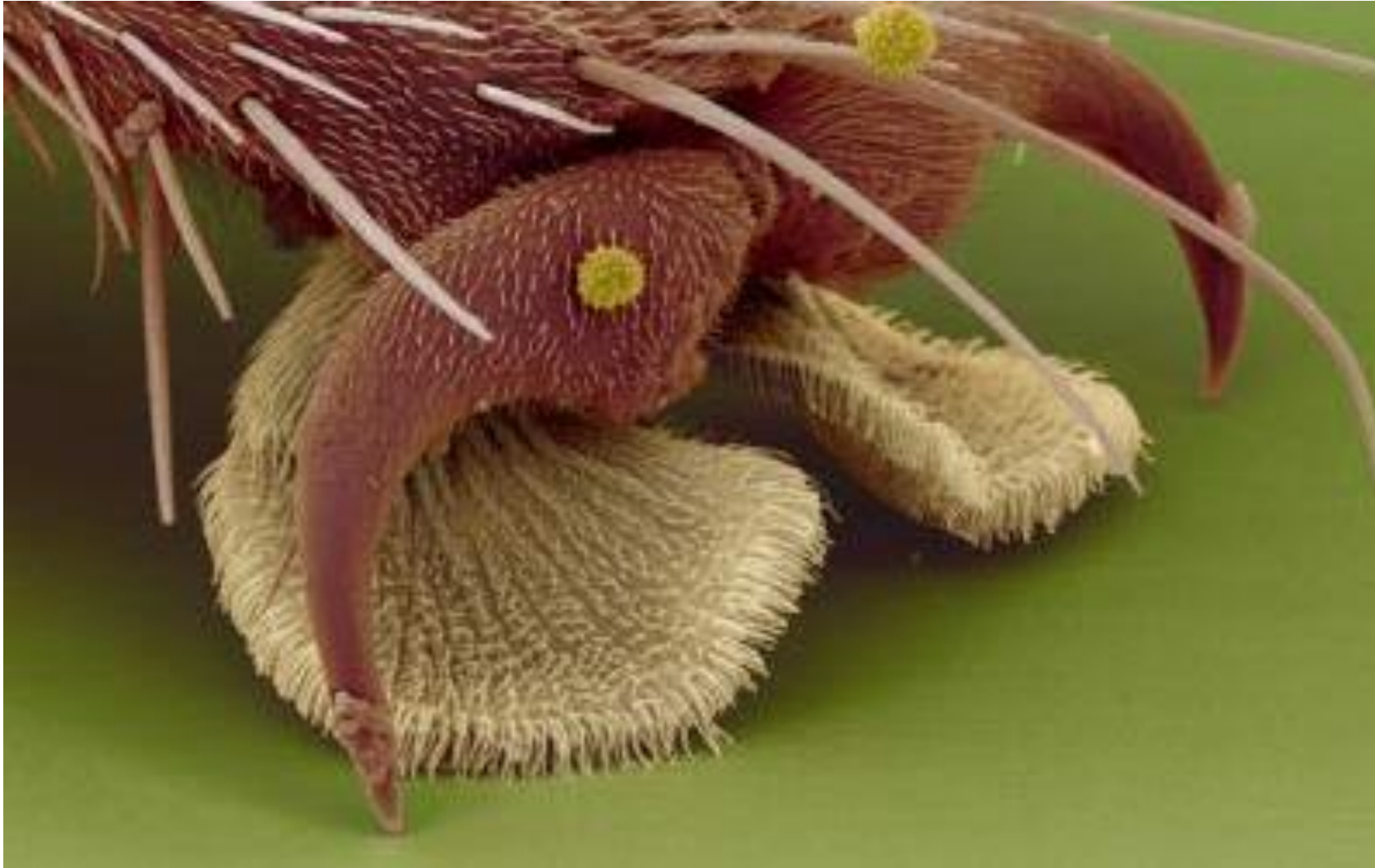
s povečanjem
stične površine



okončina gecka

Kako se lepijo površine med seboj?

preko izločanja
smol, sladkorjev, ...

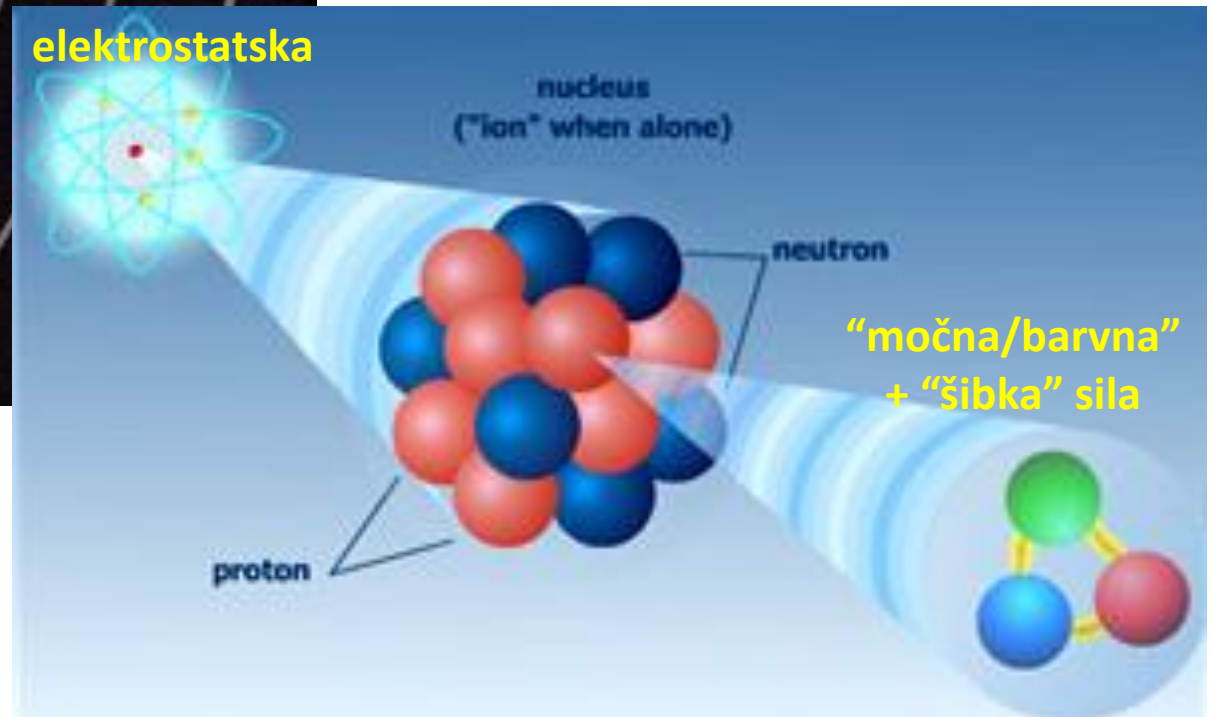
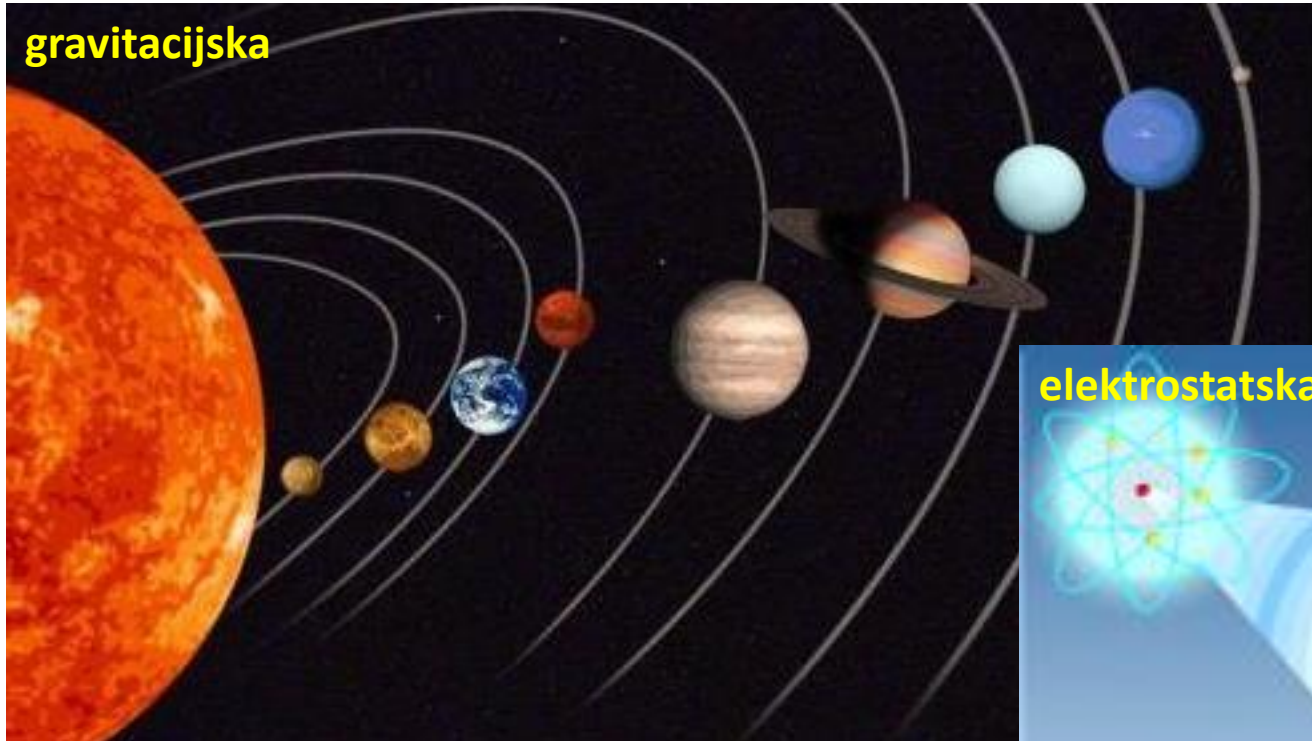


okročina muhe

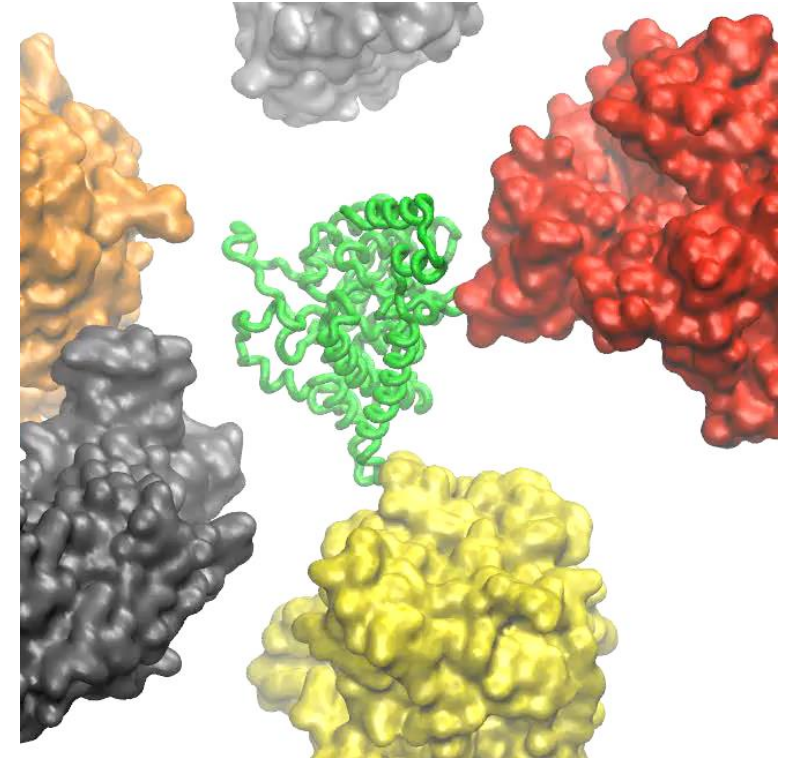
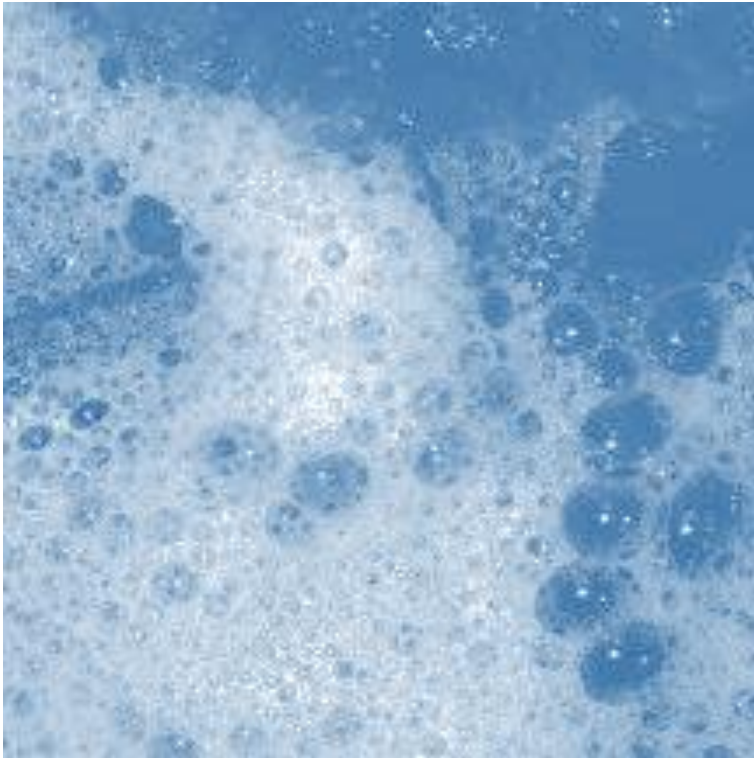
A close-up photograph of a stainless steel pot filled with water that is boiling vigorously. Numerous bubbles are visible on the surface of the water, and a plume of white steam is rising from the center of the pot. The pot is set on a white surface, likely a stovetop.

Medmolekulske interakcije

Osnovne sile



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



Elektroni: nosilci elektrostatskih interakcij

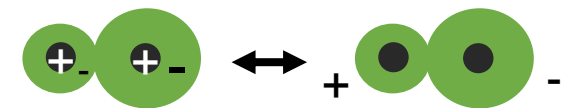
- **Elektroni** imajo **negativen naboj**.



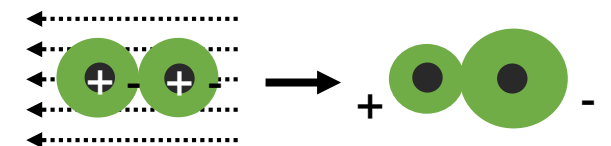
- So zelo lahki delci, zato so porazdeljeni okoli mnogo težjih jeder s pozitivnim nabojem. Elektroni tvorijo **elektronske oblake/orbitale**.



- 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**.

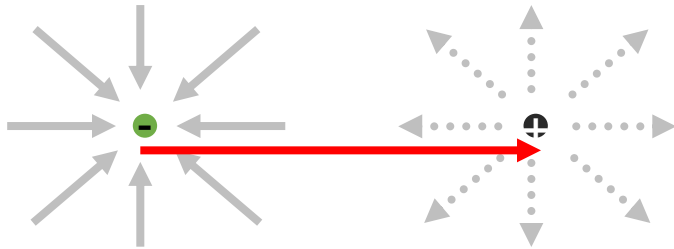


- Težišča nabojev se razmaknejo tudi pod vplivom zunanjih električnih polj. Tako nastanejo **inducirani električni dipoli**, njihova jakost je odvisna od polarizabilnosti molekule (α).



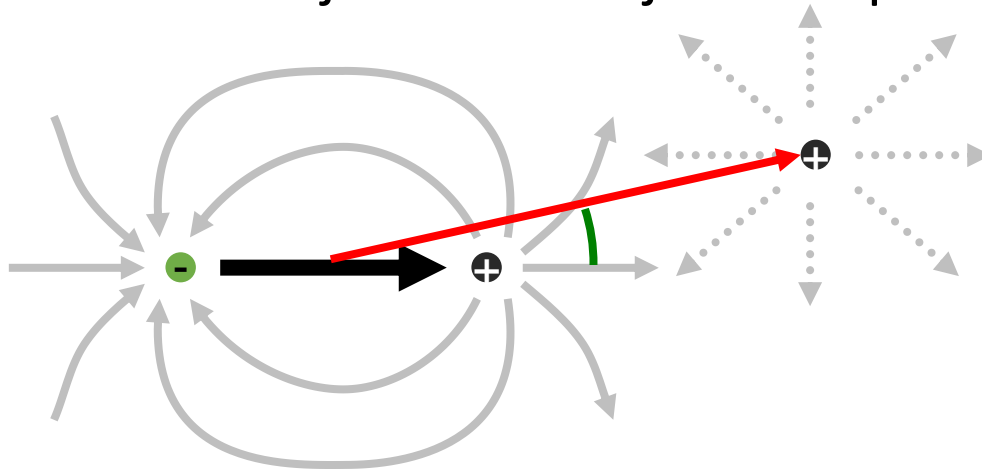
Kako daleč sežejo interakcije?

- Električna (Coulombova) interakcija med dvema nabojema



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

- Električna interakcija med nabojem in dipolom

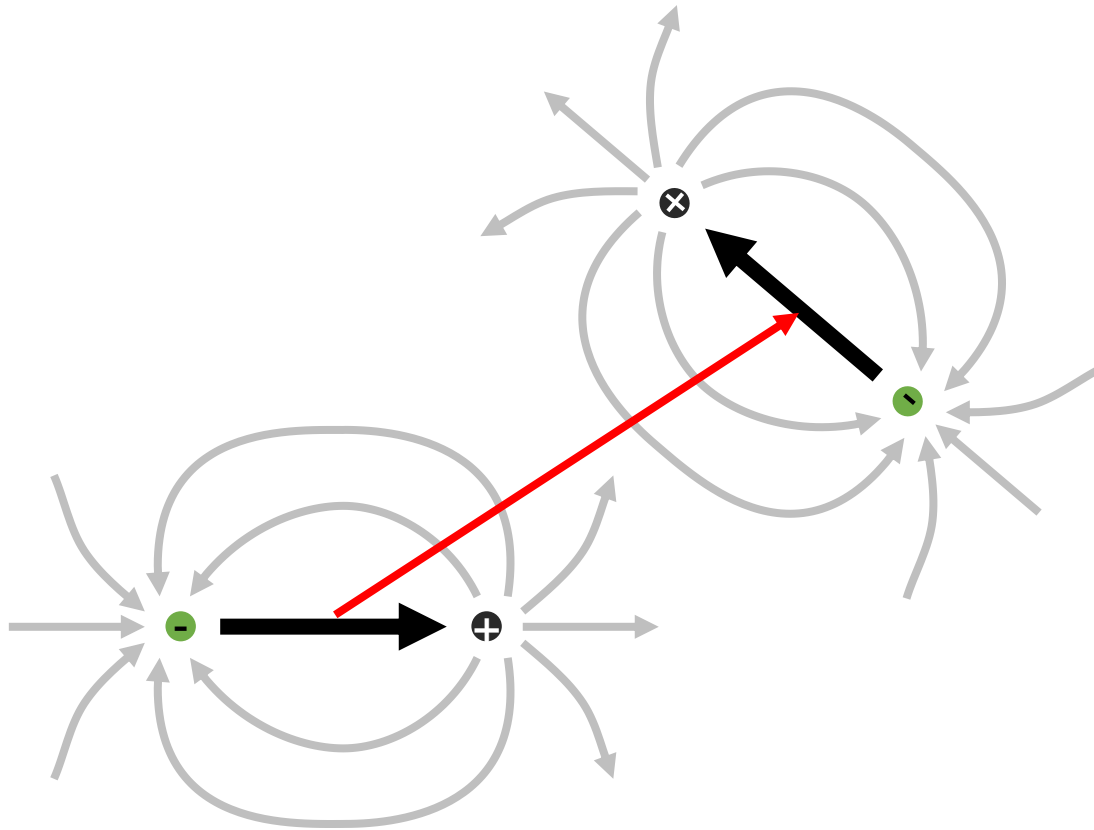


$$W \propto e_1 u_2 \frac{\cos(\varphi)}{r^2}$$

$$u_2 = e_2 d$$

Kako daleč sežejo interakcije?

- Električna interakcija med dvema dipoloma

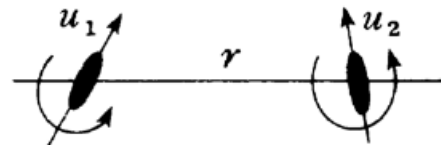


$$W \propto u_1 u_2 \frac{\cos \dots}{r^3}$$

Van der Waalsove interakcije

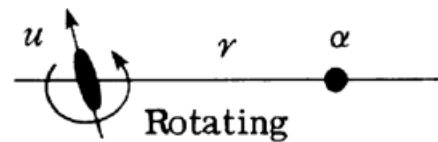
- Dipolne interakcije na osnovi polariziranih elektronskih oblakov

- Dva dipola



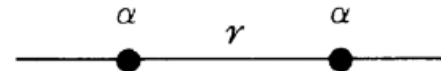
$$W \propto -\frac{u_1^2 u_2^2}{r^6 kT}$$

- Dipol + induciran dipol



$$W \propto -\frac{u_1^2 \alpha}{r^6}$$

- Dva inducirana dipola



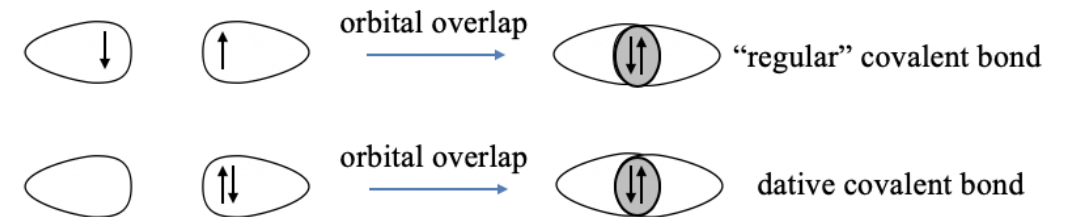
$$W \propto -\frac{\alpha^2}{r^6}$$

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

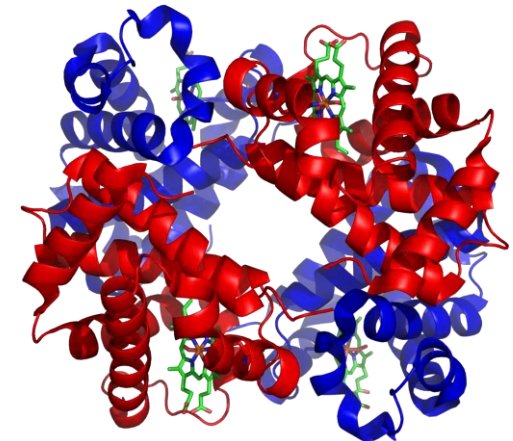
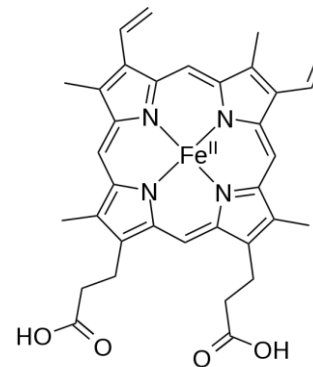
Kvantno-mehanske interakcije

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



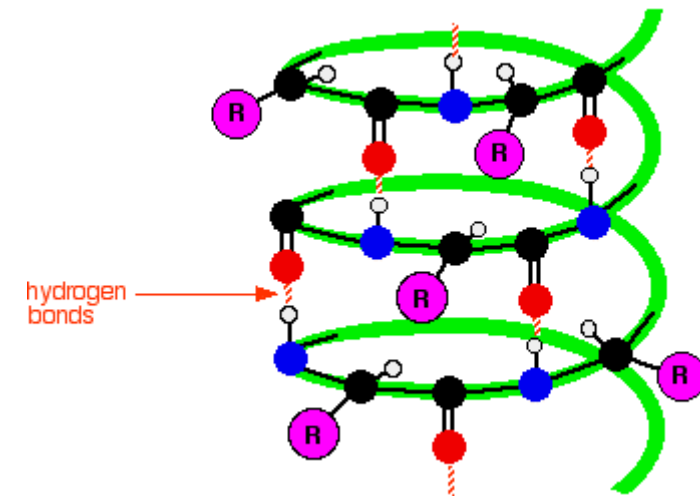
hemoglobin



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°C) je $kT = 0.0267\text{ eV}$

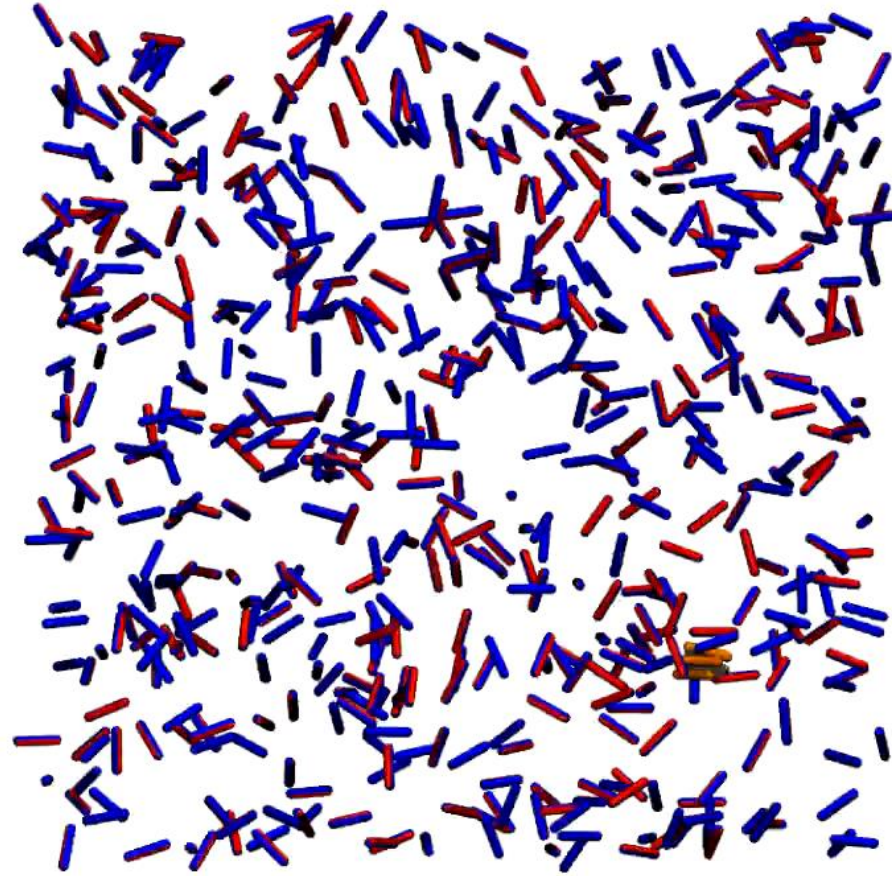
<i>interakcija</i>	<i>energija</i>		<i>razmerje proti kT</i>
	<i>kJ/mol</i>	<i>eV</i>	<i>kT</i>
kovalentna	200–900	2–9	80–350
ionska	400–800	4–8	150–300
van der Waalsova	2– velika	0.02– velika	1– veliko
vodikova	5–25	0.05–0.25	2–10



Poglejmo v disperzijo delcev

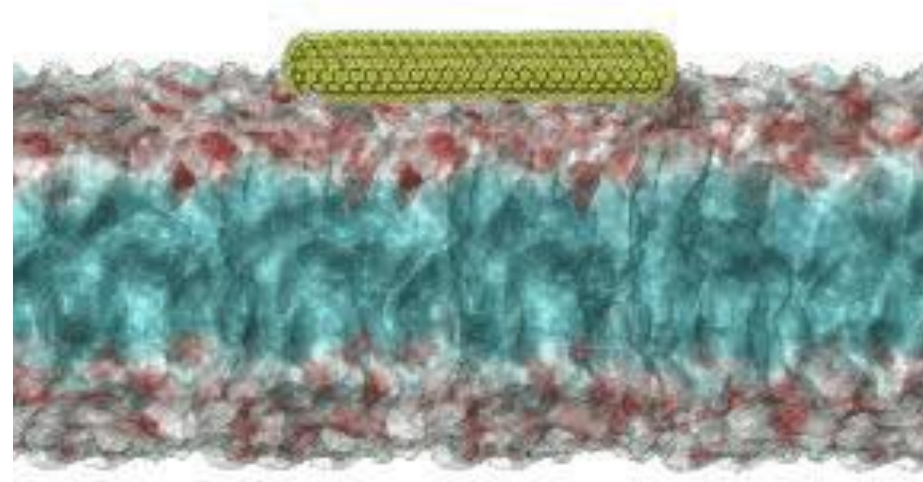
Agregacija proteinov v fibrile

Množica
patofizioloških problemov
povezanih z agregacijo



Vdor ogljikove nanocevke v membrano

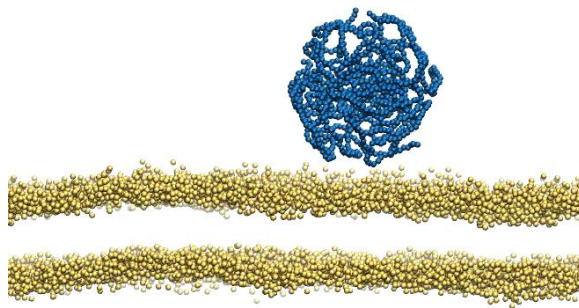
Množica
novih nanomaterialov z
nepredvidljivimi vplivi



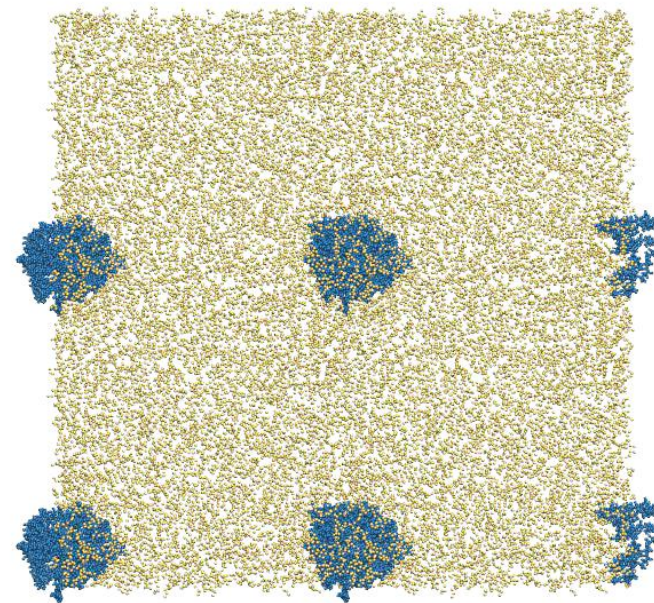
“Raztapljanje” polimernega nanodelca v membrani

Degradacija polimernih odpadkov

čas: 1 μ s

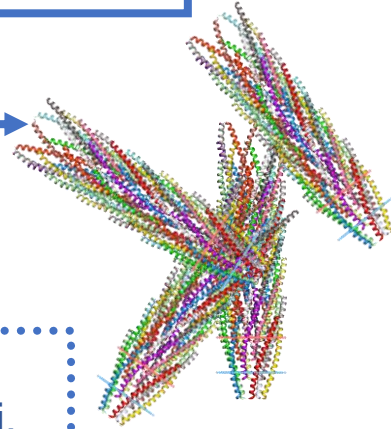


čas: 10 μ s



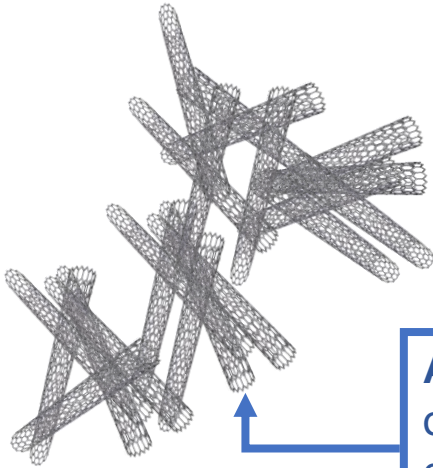
Proteinski agregati:

Proteini v virusnih plaščih ali pri amiloidozah



Pufer:

fosfatni in nitratni anioni,
kalijeve in natrijeve kationi

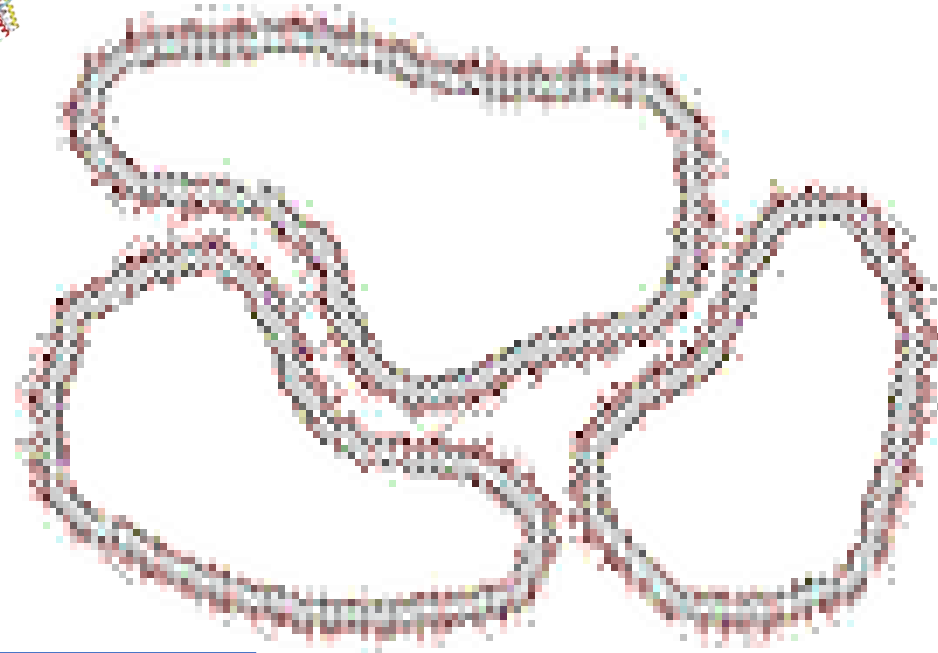


Agregati nanodelcev:

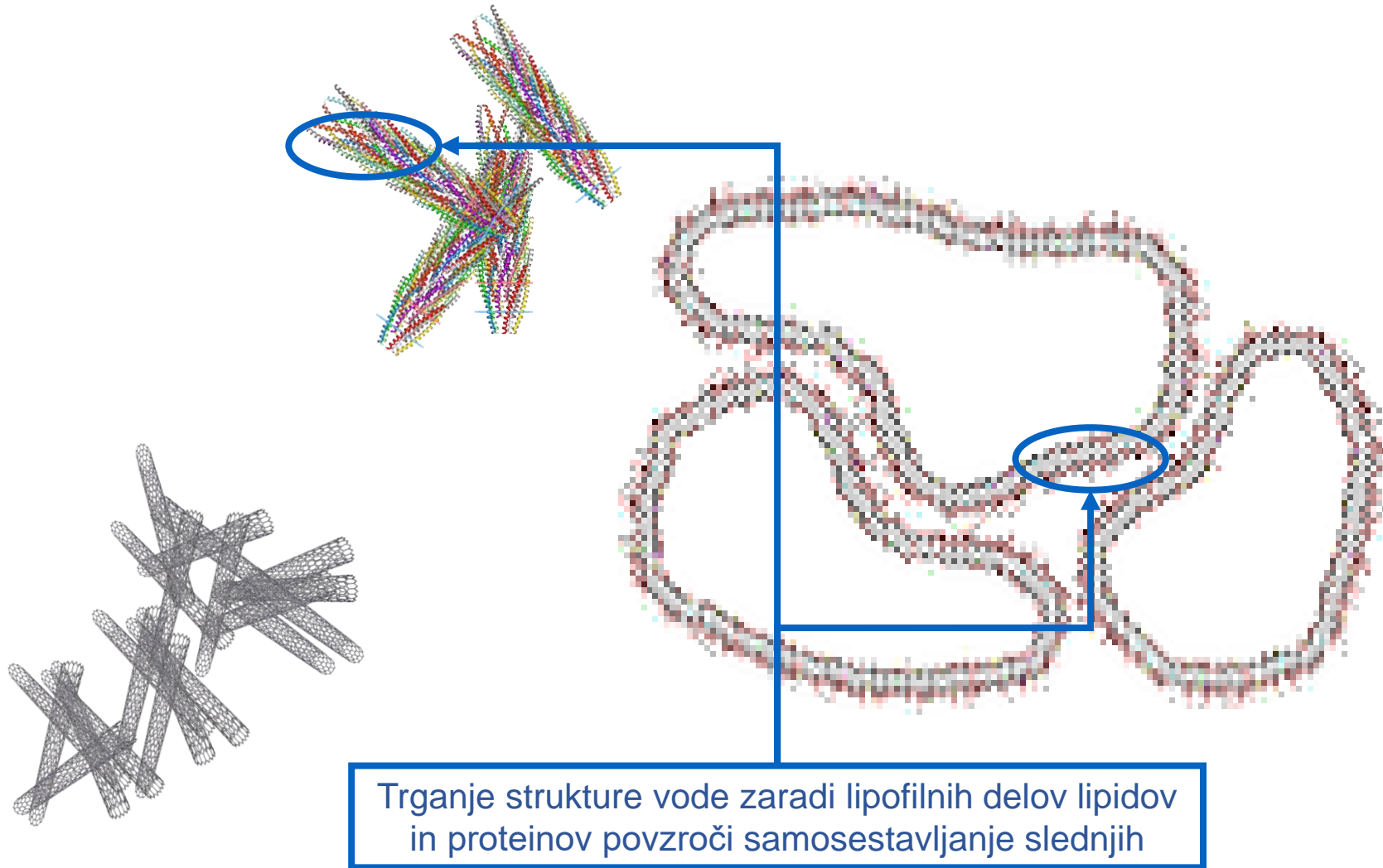
ogljikovi, titanatni,...
disociirane hidroksilne
skupine na površini

Skupki lipidnih vesiklov:

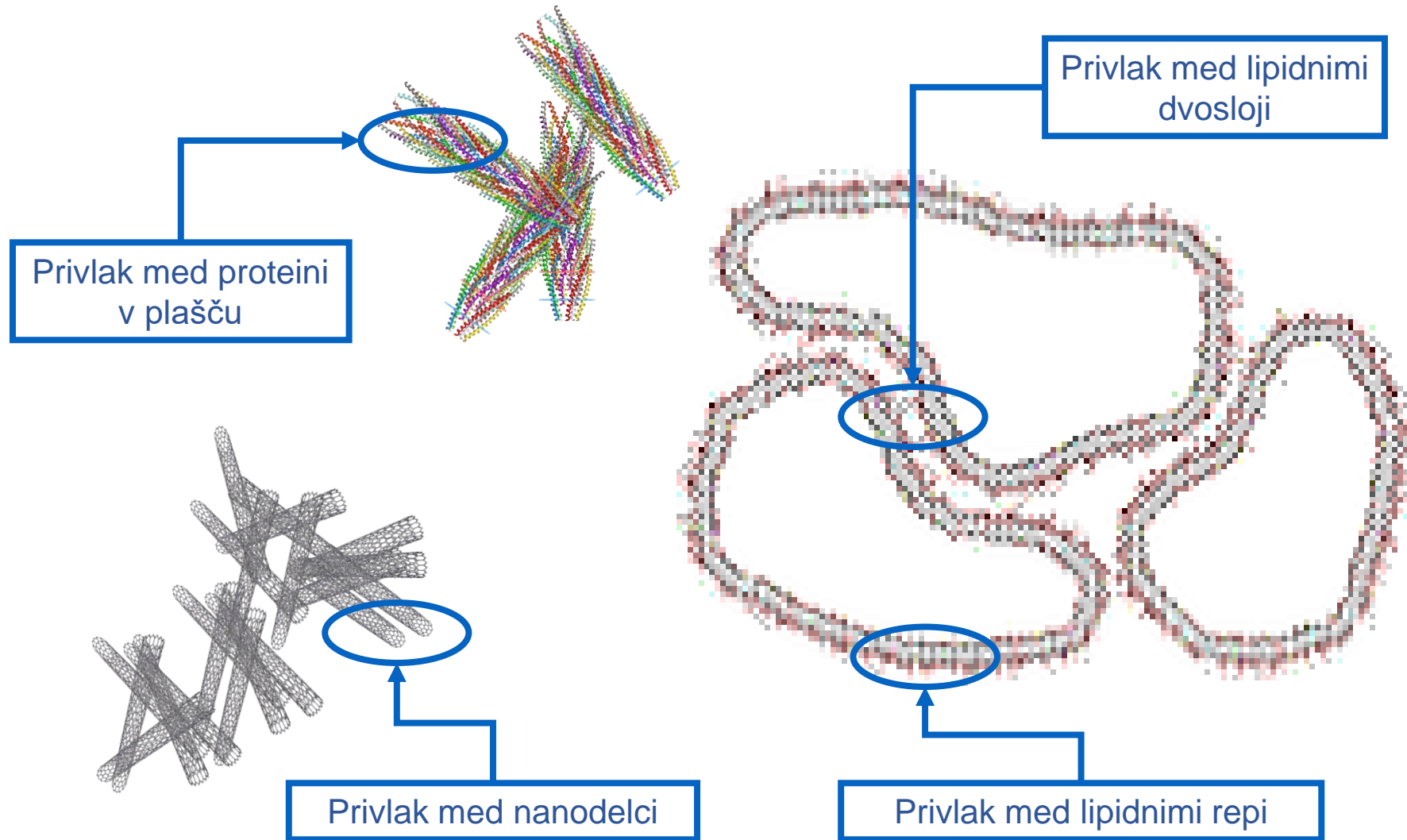
Zwitterionski fosfolipidi,
disociirani fosfolipidi,
disociirani glikosfingolipidi



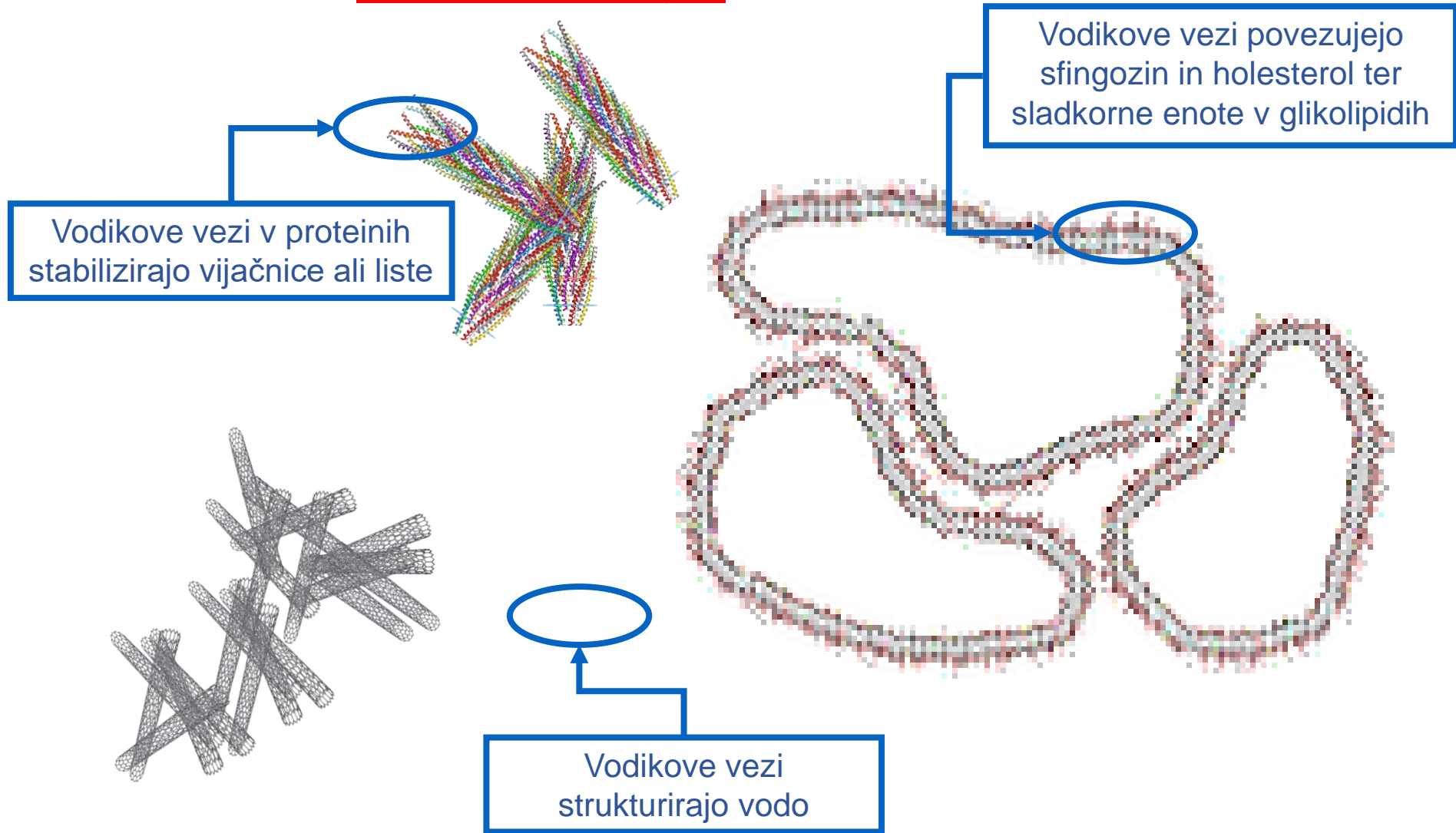
Hidrofobna “interakcija” sestavi



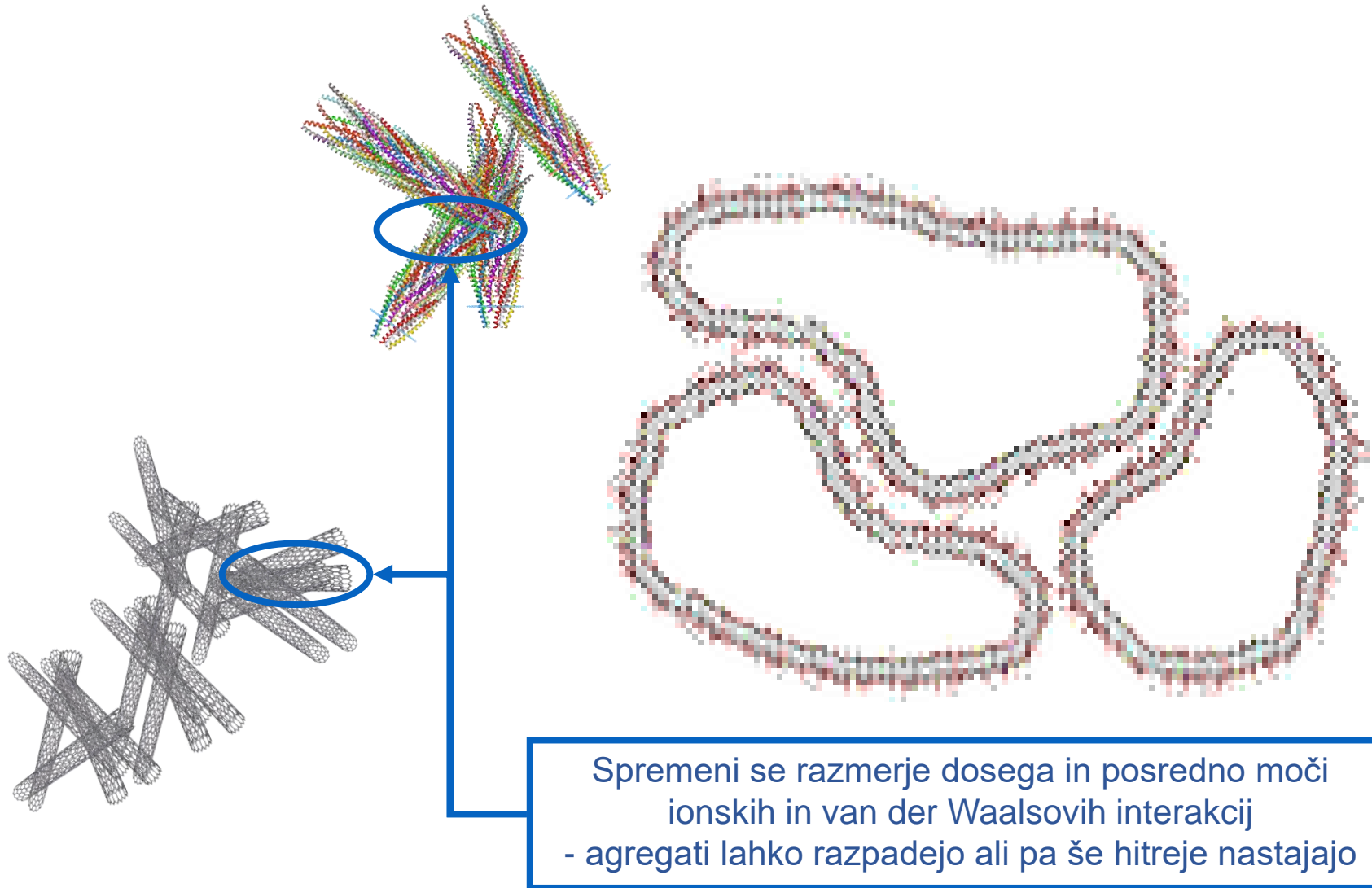
Van der Waalsove interakcije agregirajo



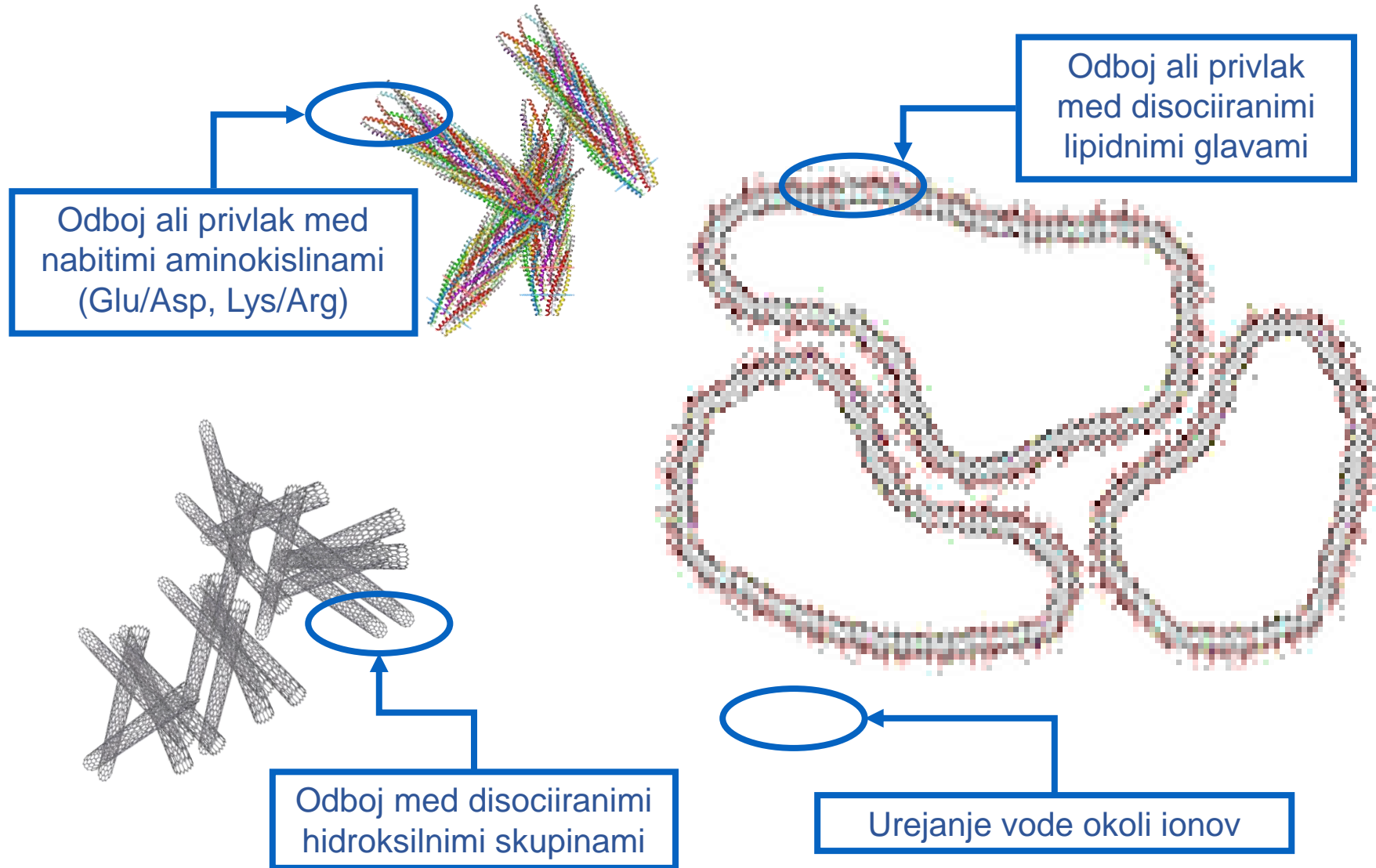
Vodikove vezi stabilizirajo



Ioni v raztopini senčijo interakcije dolgega dosega



Ionske in dipolne interakcije prestrukturirajo



Fluktuacijske sile razmikajo

