

# Medmolekulske interakcije

HELLO!





Kako se lepijo površine med seboj ?

z izsesavanjem zraka ...

površina POST-IT

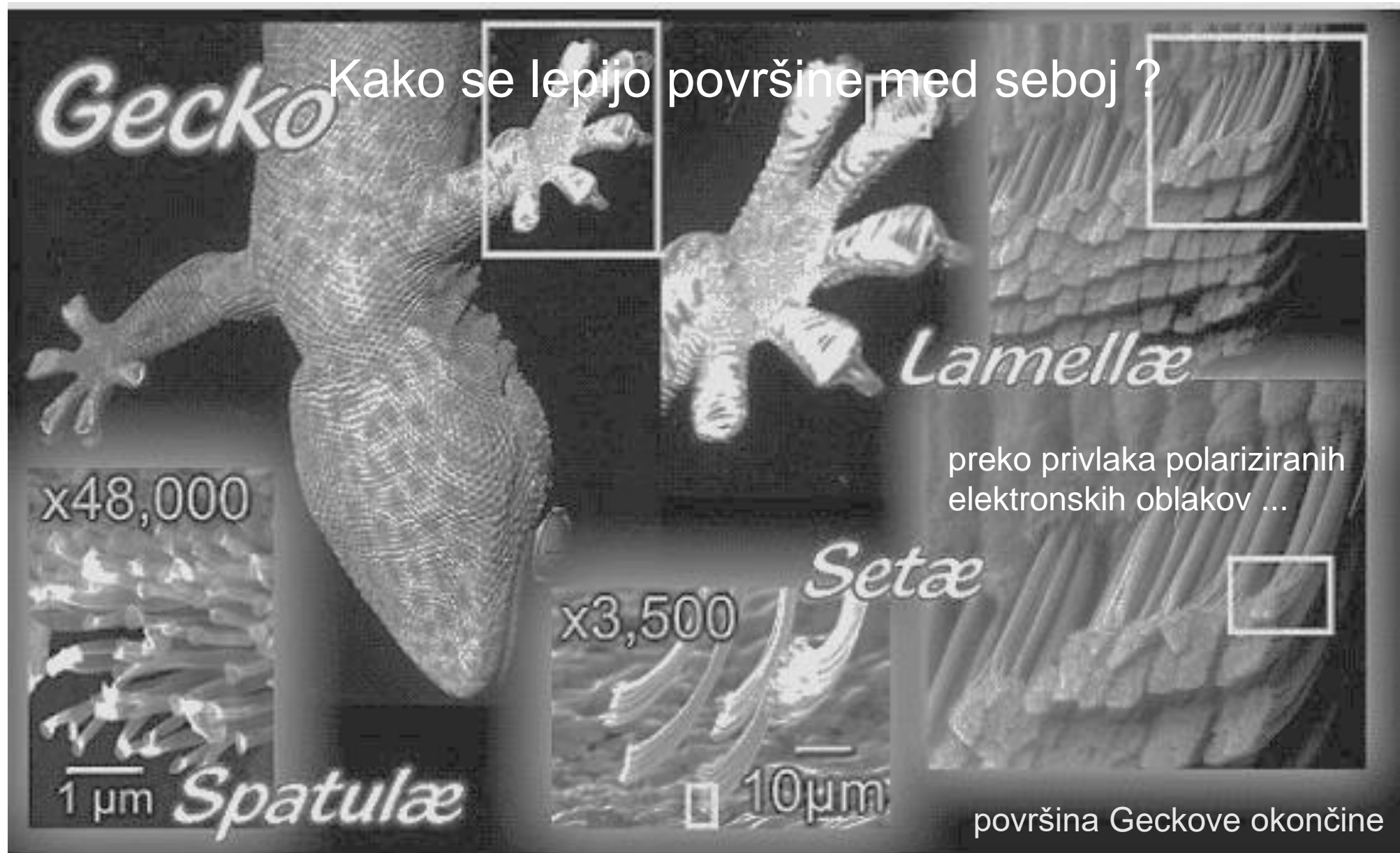


Kako se lepijo površine med seboj ?

preko izločanja sladkorjev, smol ...

površina muhine okončine





## Medmolekulske interakcije





# Osnovne sile

gravitacija

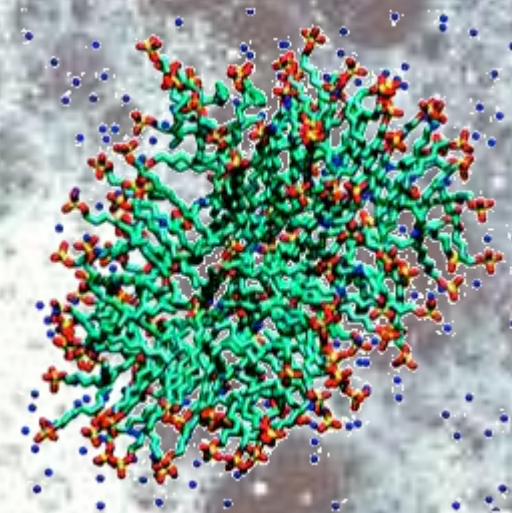
elektrostatika

barvna ("močna") sila  
+ "šibka" sila

Quarks and gluons

# V molekularnem svetu ...

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



# $e^-$ : nosilci elektrostatskih interakcij

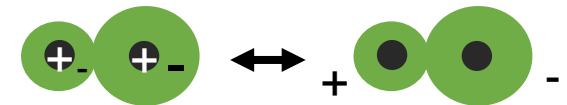
- **Elektroni** imajo negativen naboj.



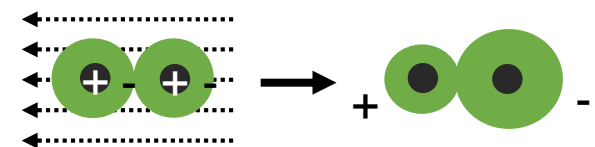
- So zelo lahki delci, zato so porazdeljeni okoli mnogo težjih jeder s pozitivnim nabojem. Elektroni tvorijo **elektronske oblake/orbitale**.



- 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**.



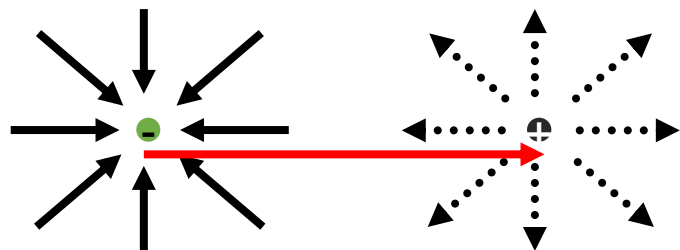
- Težišča nabojev se razmaknejo tudi pod vplivom zunanjih električnih polj. Tako nastanejo **inducirani električni dipoli**, njihova jakost je odvisna od polarizabilnosti molekule ( $\alpha$ ).





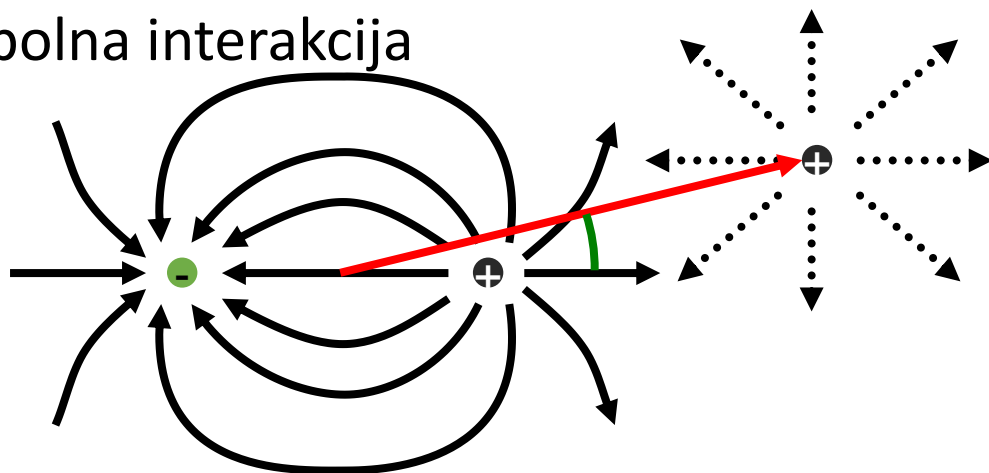
# Kako daleč sežejo interakcije?

- Električna (Coulombova) interakcija



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

- Električna dipolna interakcija



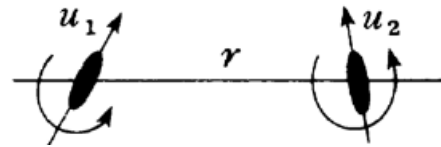
$$W \propto e_1 u_2 \frac{\cos(\varphi)}{r^2}$$

$$u_2 = ed$$

# Van der Waalsove interakcije

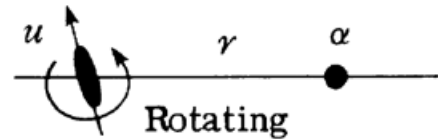
- Dipolne interakcije na osnovi polariziranih elektronskih oblakov

- Dva dipola



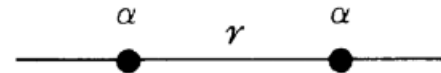
$$W \propto \frac{1}{r^6 kT}$$

- 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, 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).

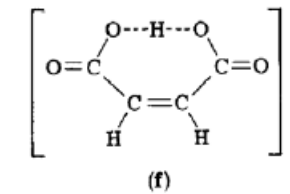
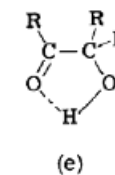
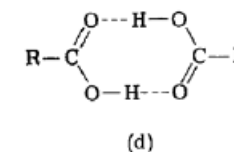
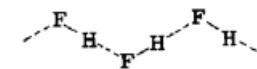
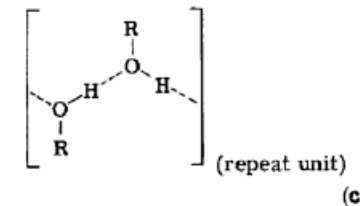
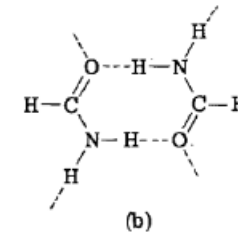
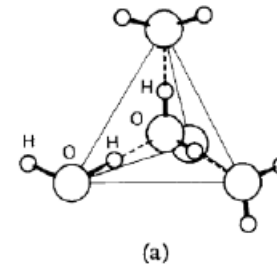
- **Kovalentna in koordinativna vez**

(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





# Temperatura

- V molekularnem svetu primerjamo energije interakcij s termično energijo:

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

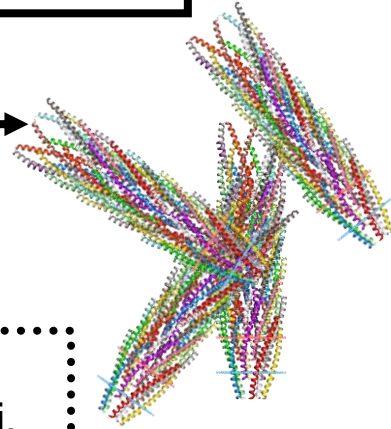
<i>interakcija</i>	<i>energija</i>		<i>razmerje proti <math>kT</math></i>
	$\text{kJ/mol}$	$\text{eV}$	$kT$
kovalentna	200 - 900	2 - 9	80 - 350
ionska	400 - 800	4 - 8	150 - 300
van der Waalsova	2 - <b>velika</b>	0.02 - <b>velika</b>	1 - <b>veliko</b>
vodikova	5 - 25	0.05 - 0.25	2 - 10



Poglejmo v disperzijo delcev

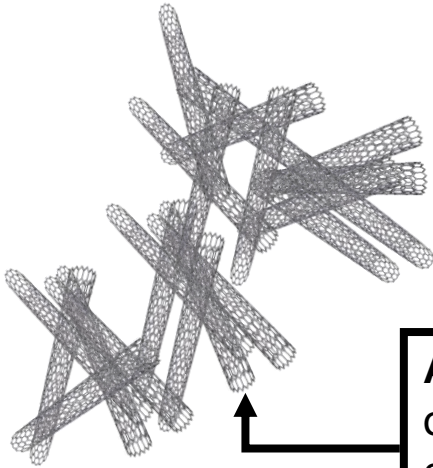
**Proteinski agregati:**

Proteini v virusnih plaščih ali pri amiloidozah



**Pufer:**

fosfatni in nitratni anioni,  
kalijeve in natrijeve kationi

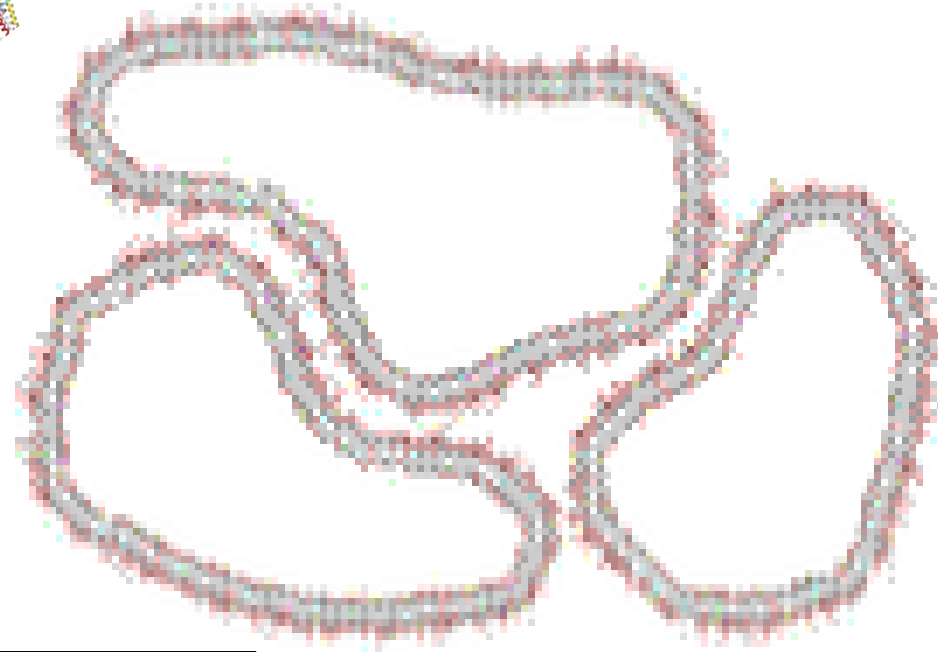


**Agregati nanodelcev:**

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

**Skupki lipidnih vesiklov:**

Zwitterionski fosfolipidi,  
disociirani fosfolipidi,  
disociirani glikosfingolipidi

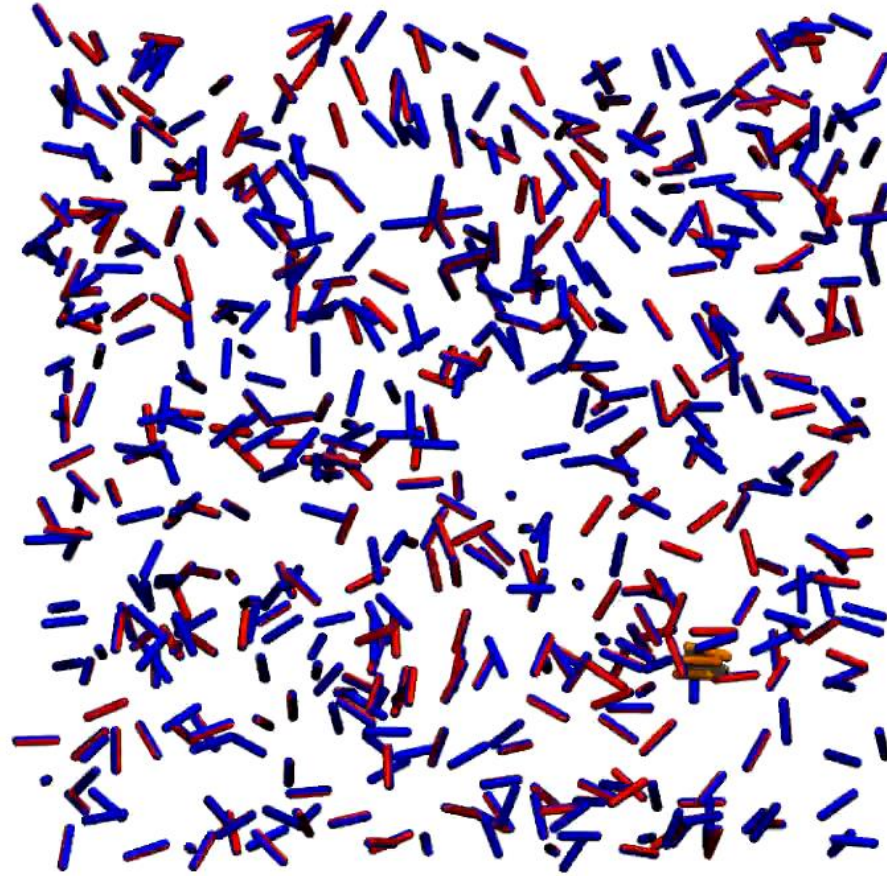




# Agregacija proteinov v fibrile

Coarse grained MD

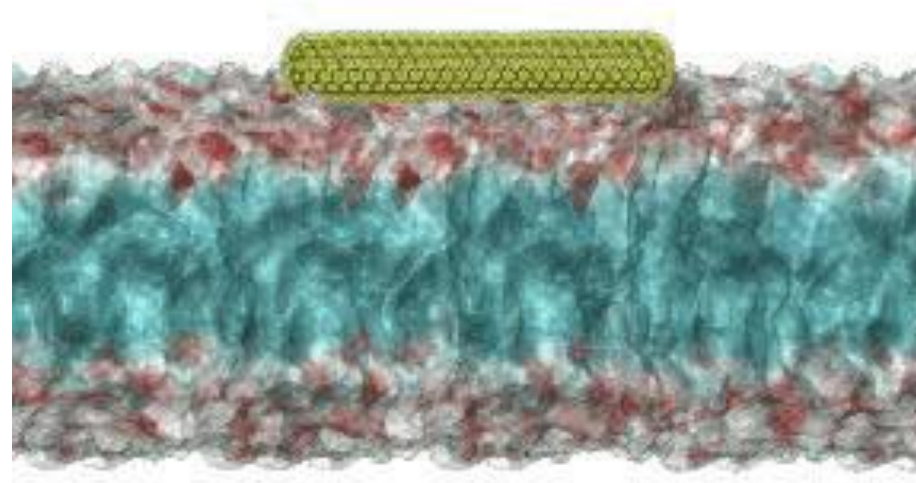
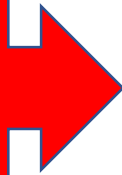
Množica  
patofizioloških problemov  
povezanih z agregacijo



# Vdor ogljikove nanocevk v membrano

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

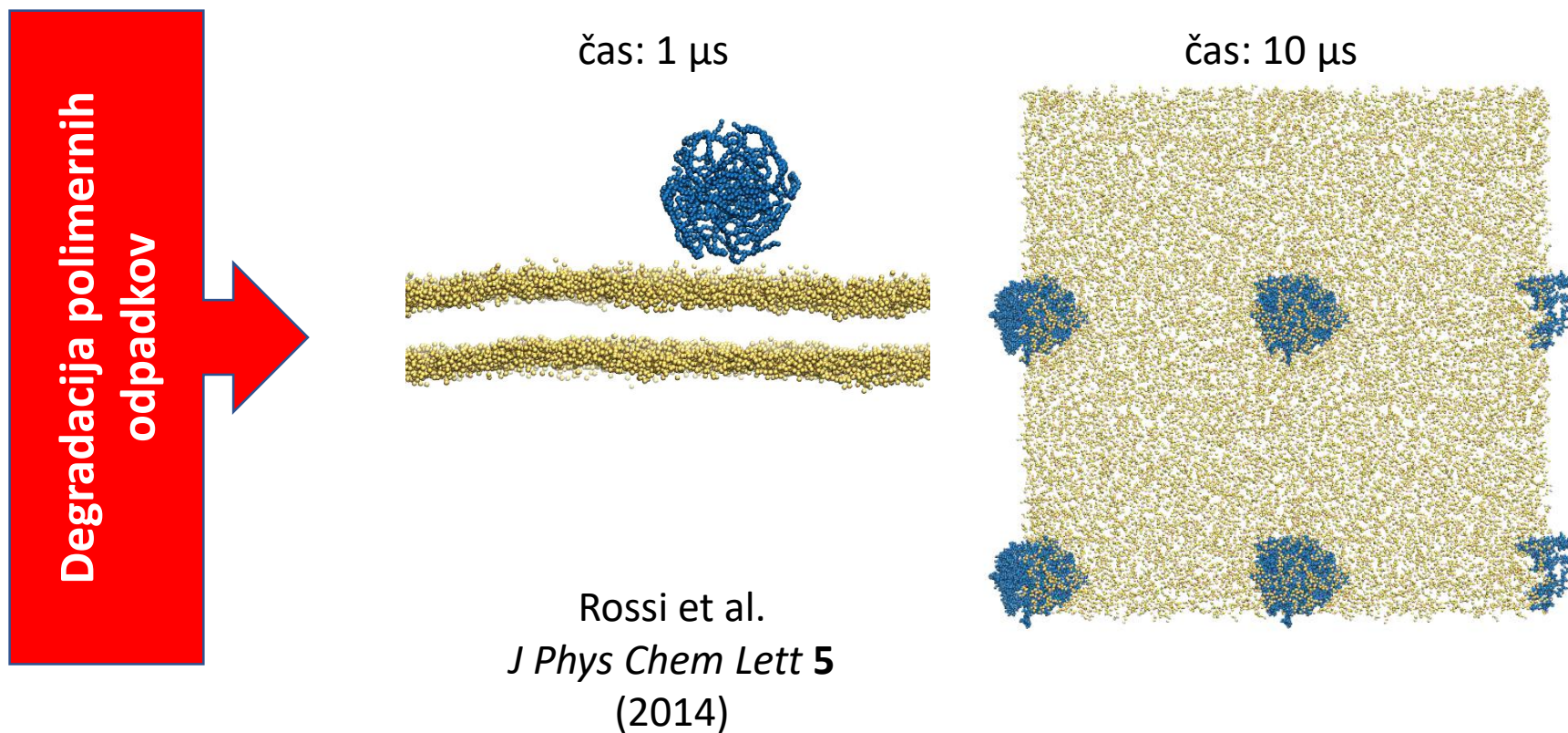
Množica  
novih nepredvidljivih  
nanomaterialov



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

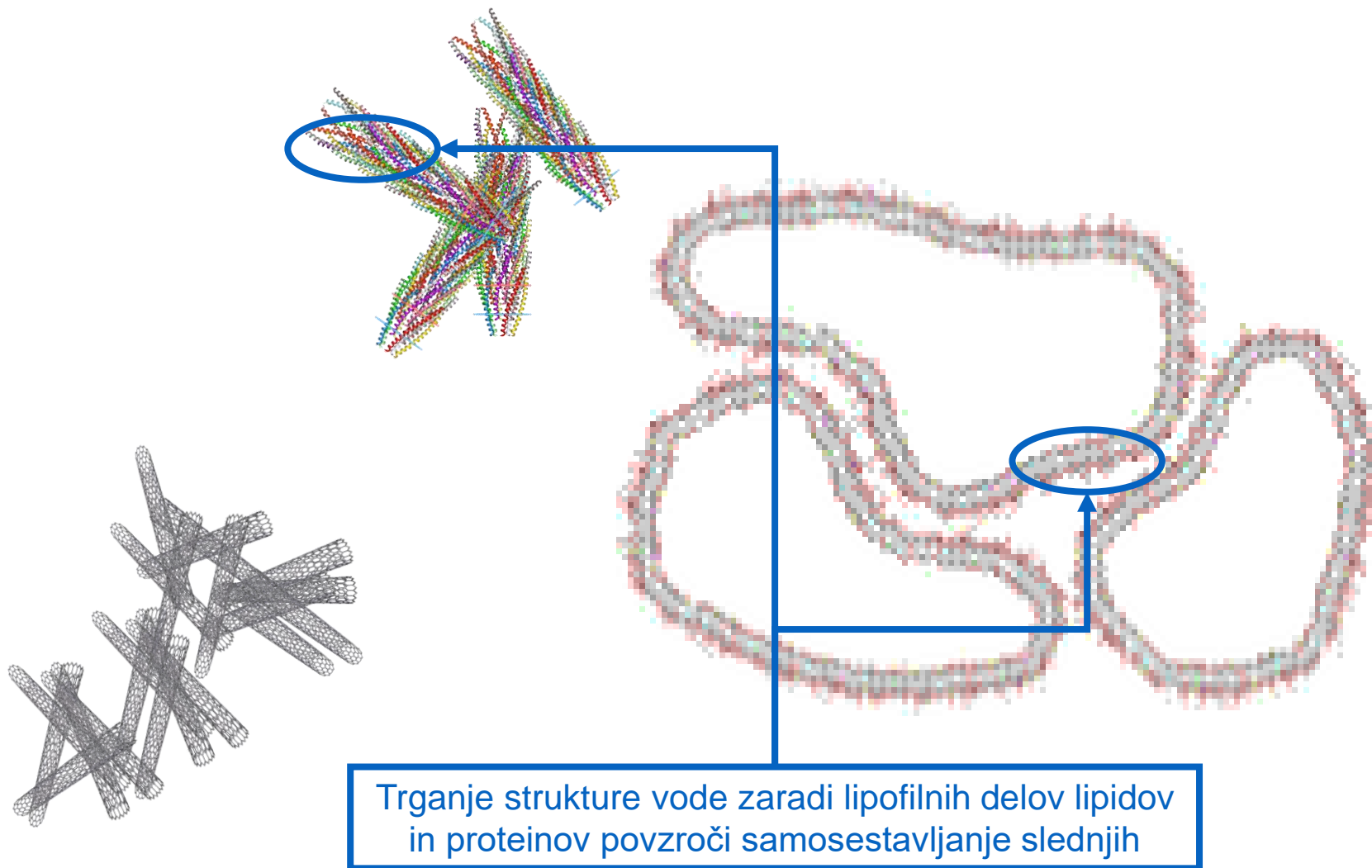
# „Raztapljanje“ polimernega nanodelca v membrani

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

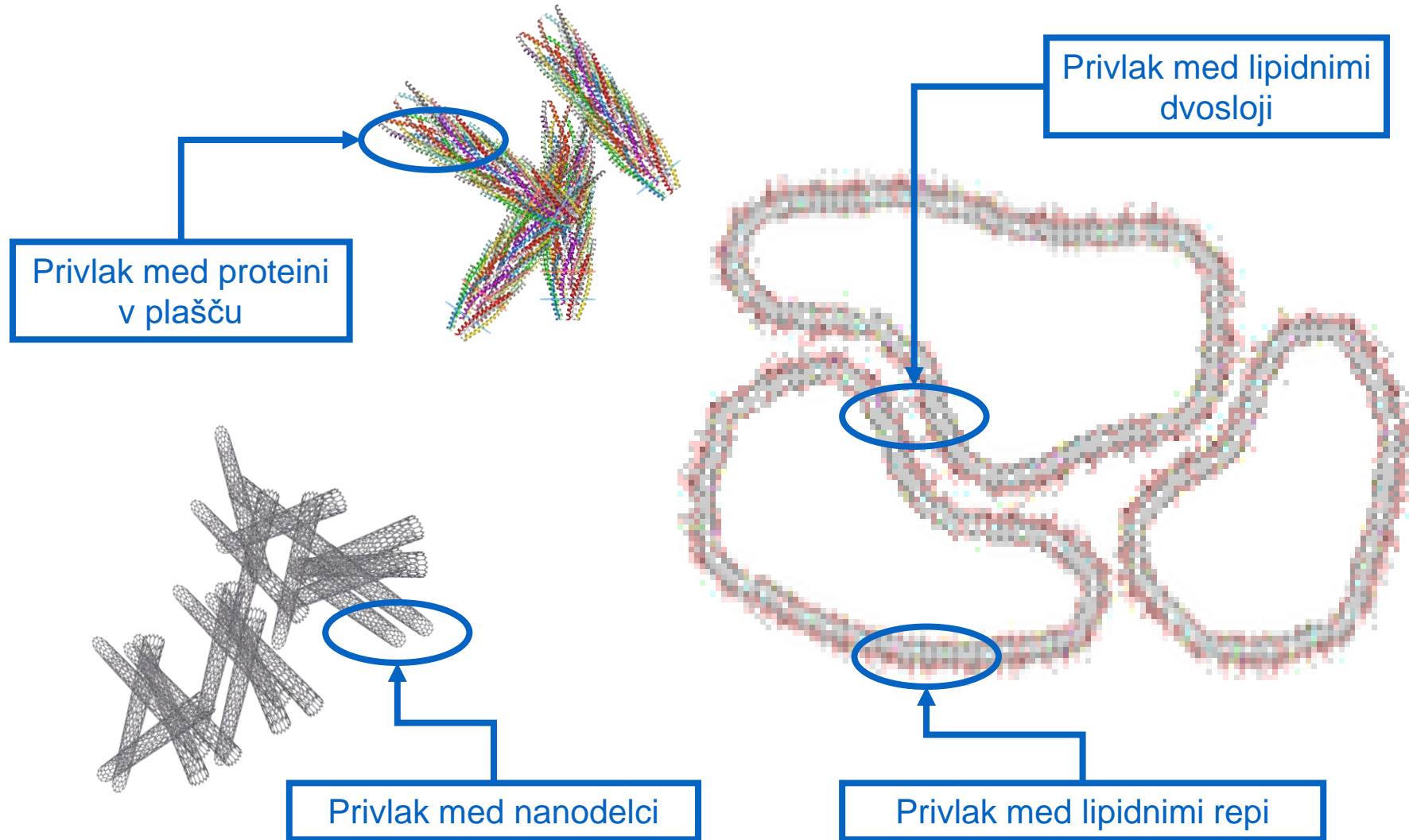




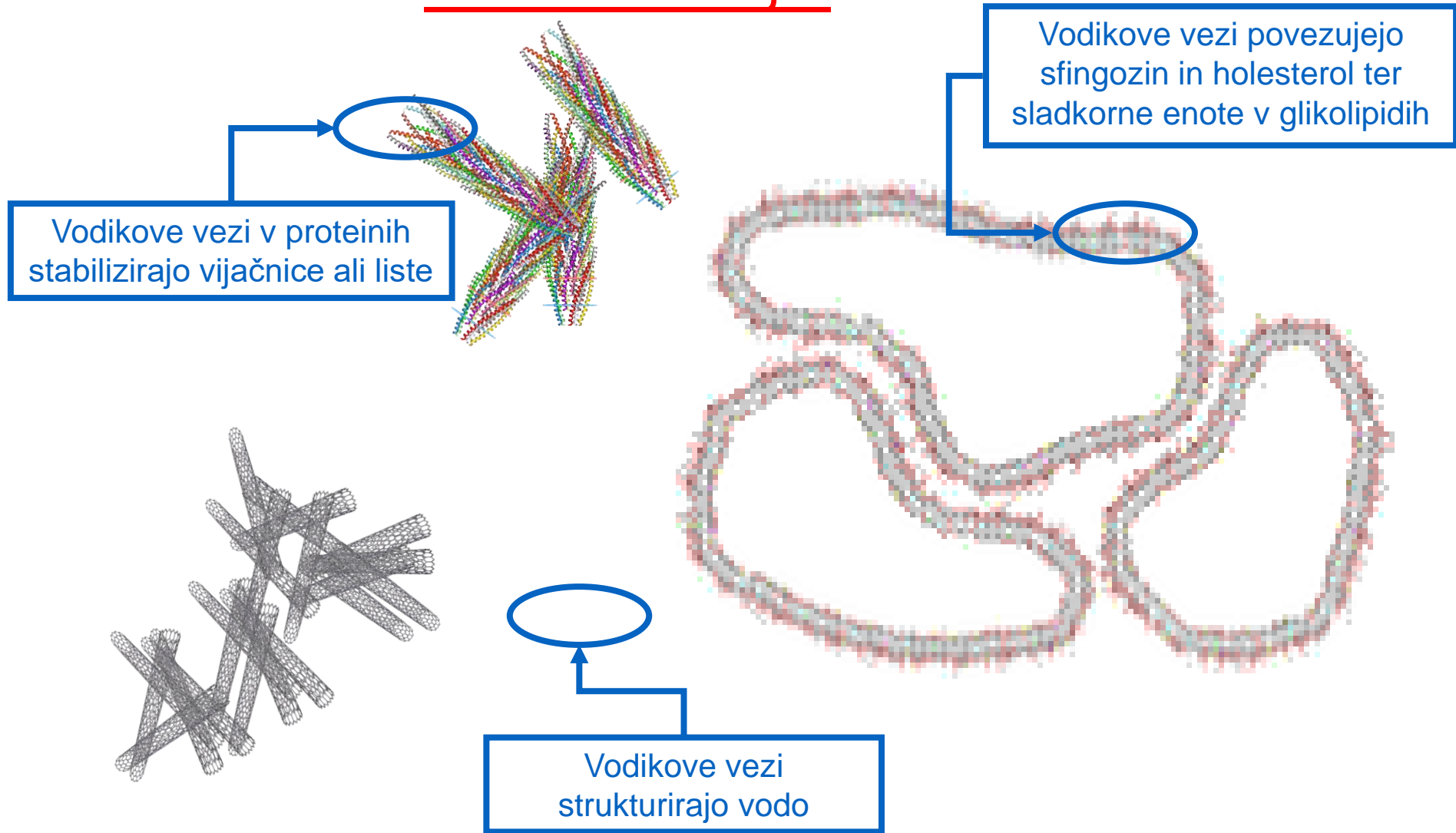
# Hidrofobna “interakcija” sestavi



# Van der Waalsove interakcije agregirajo

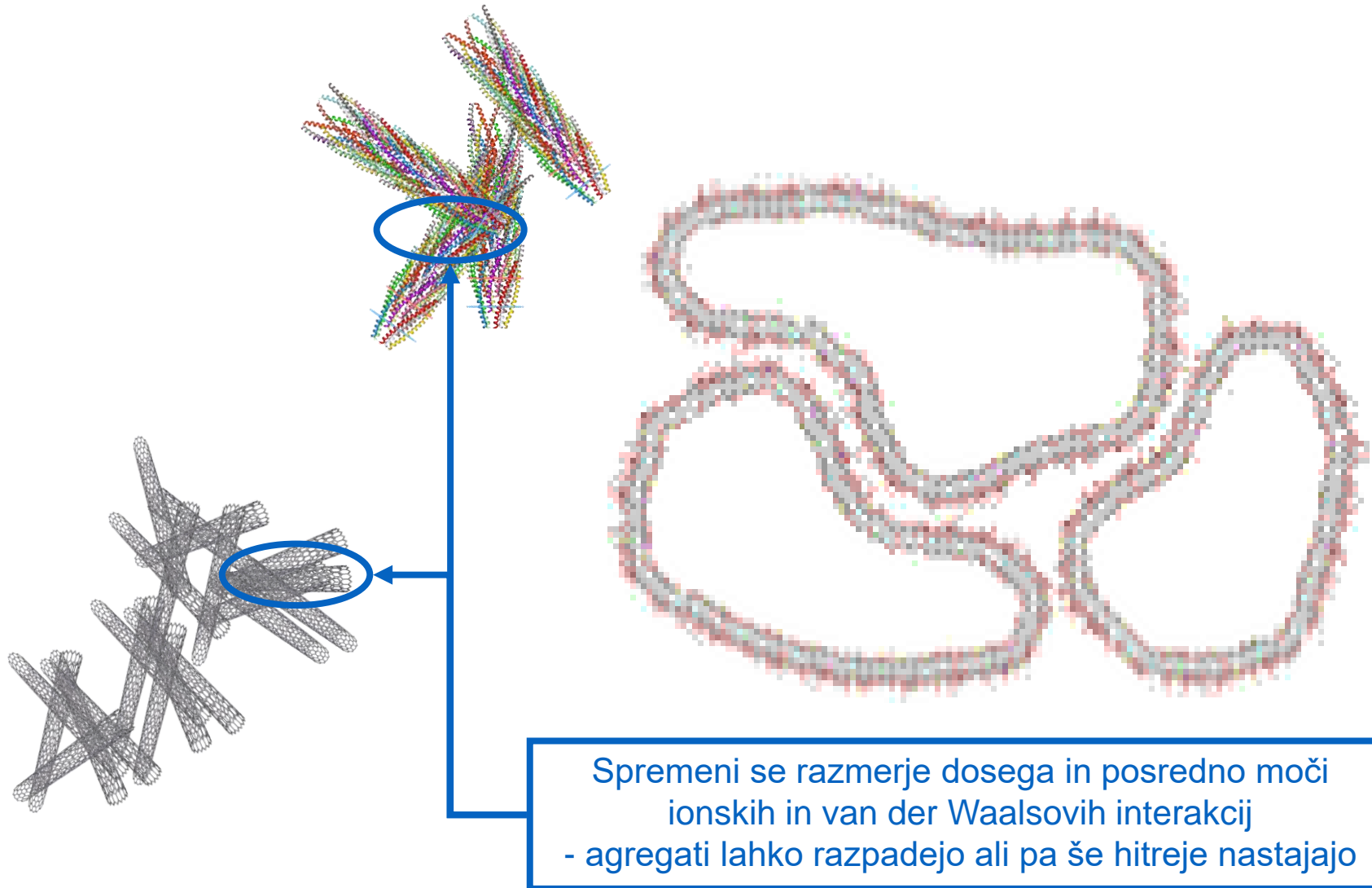


# Vodikove vezi stabilizirajo

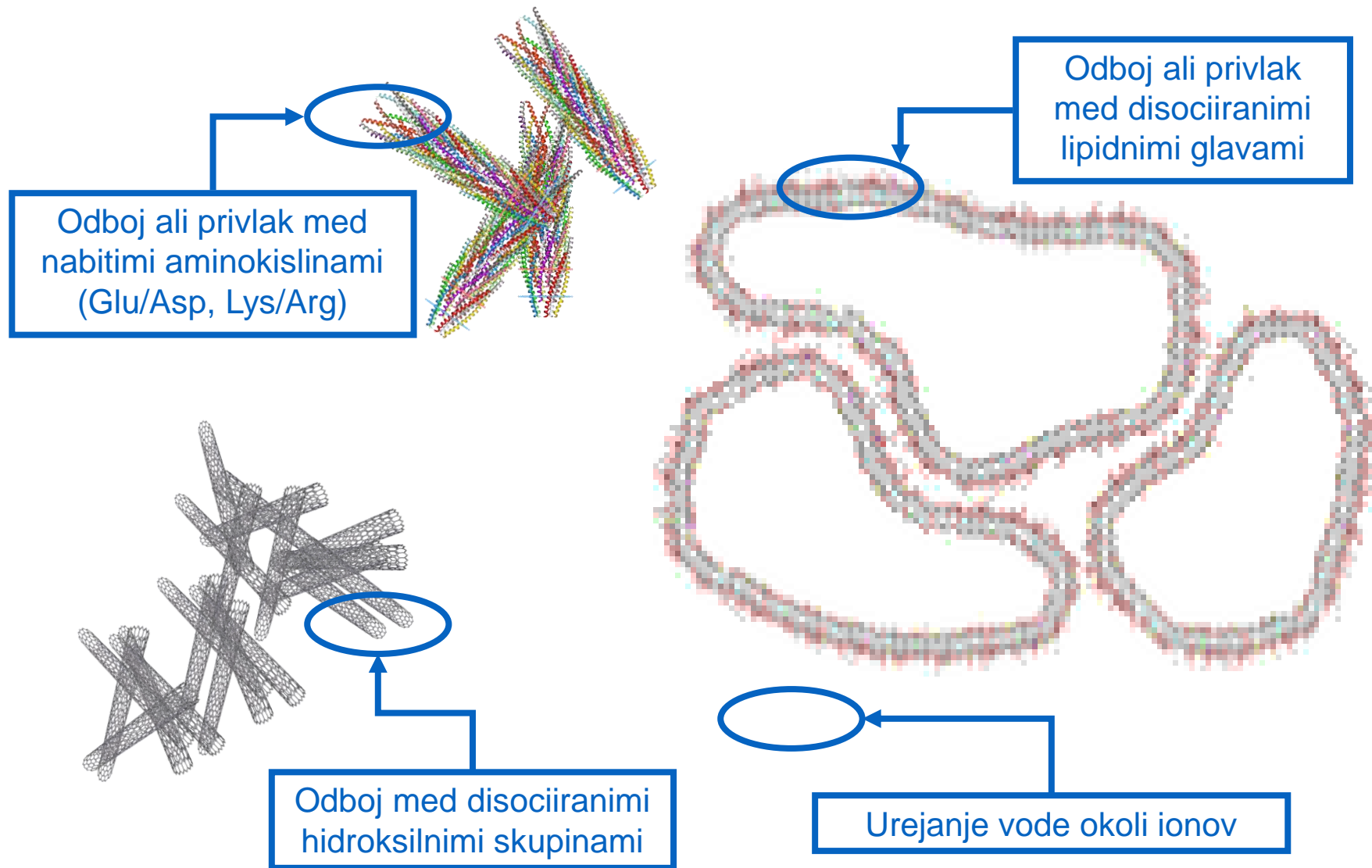




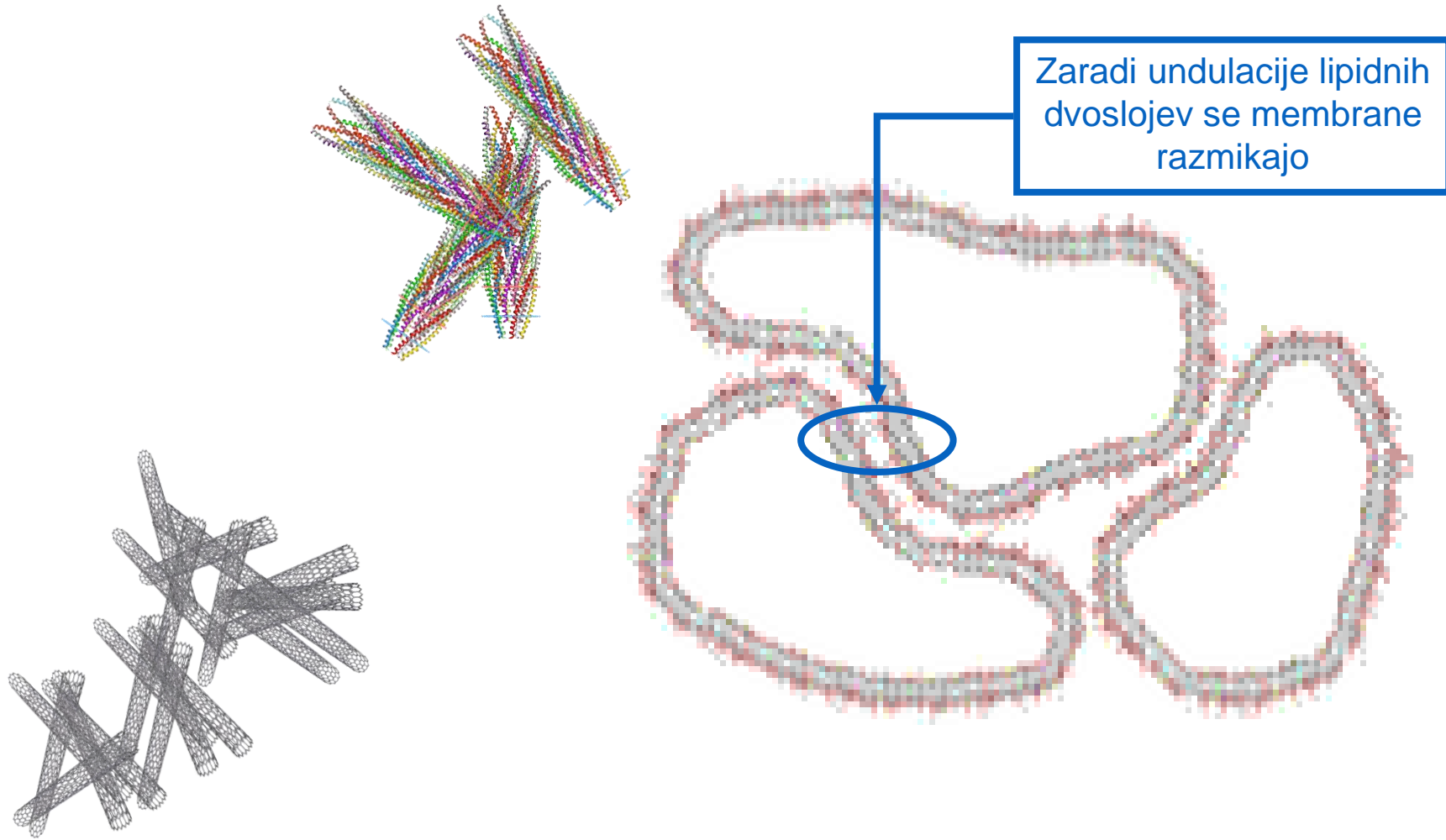
# Ioni v raztopini senčijo interakcije dolgega dosega



# Ionske in dipolne interakcije prestrukturirajo



# Fluktuacijske sile razmikajo

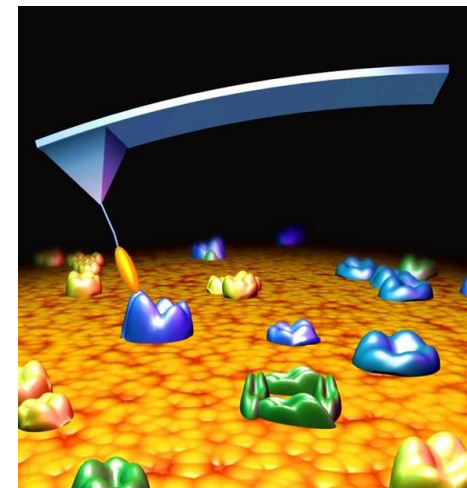
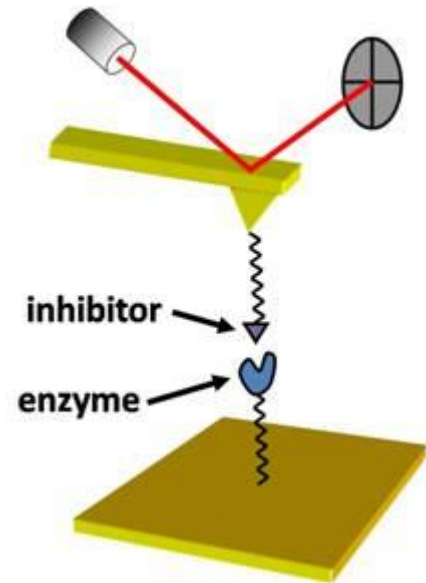
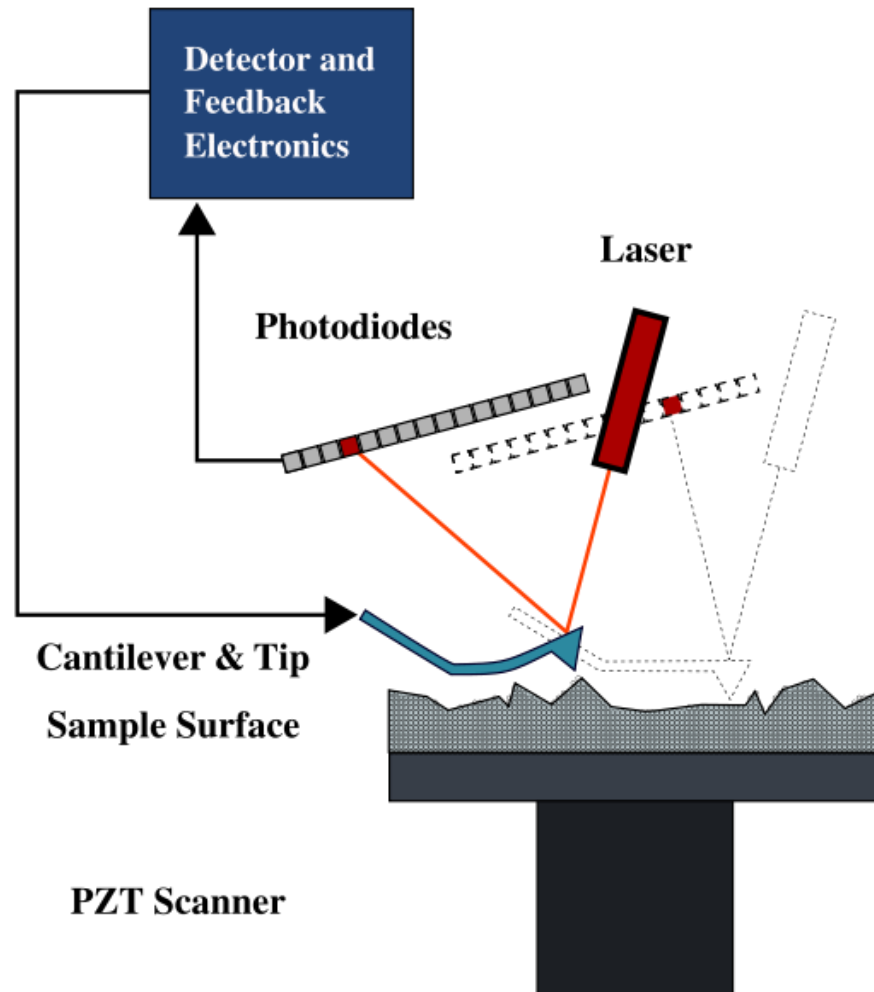




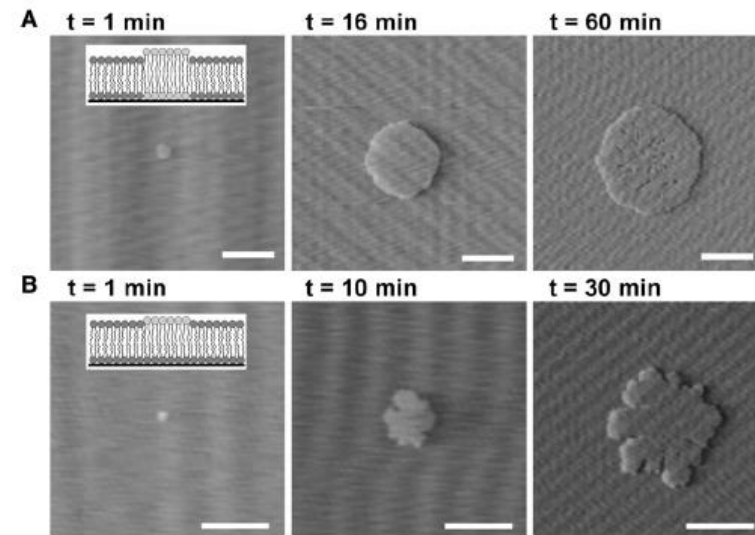
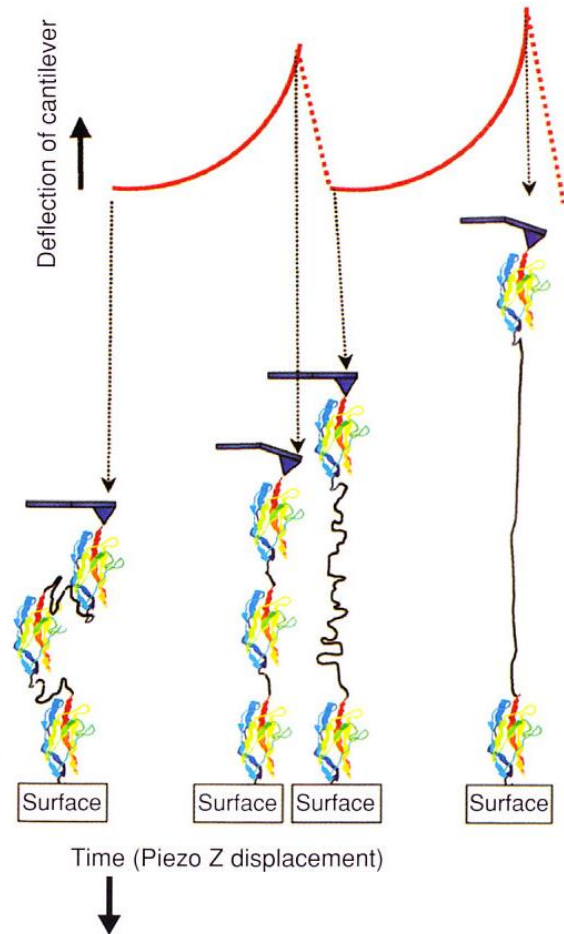
Kako pa bi pogledali med  
molekule ?



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

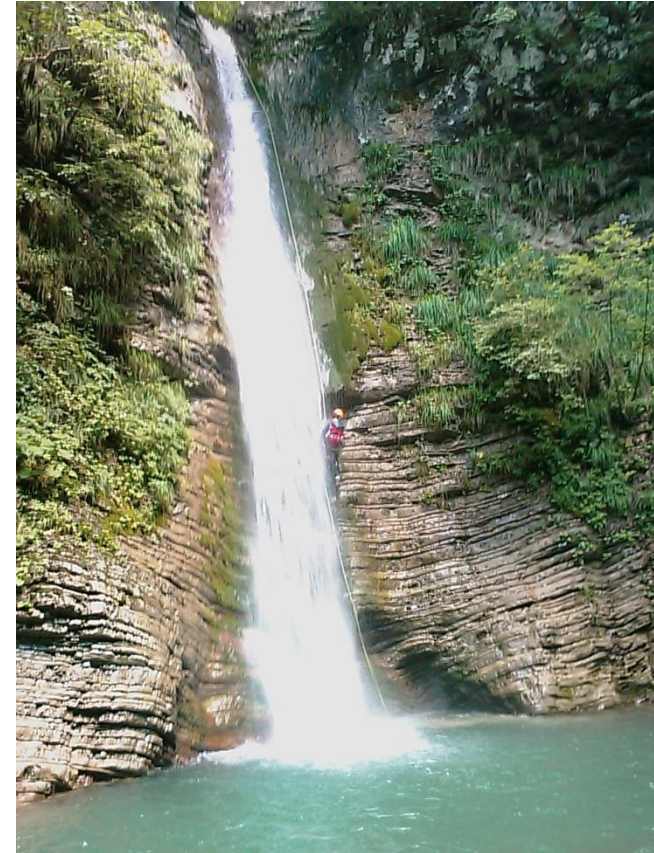
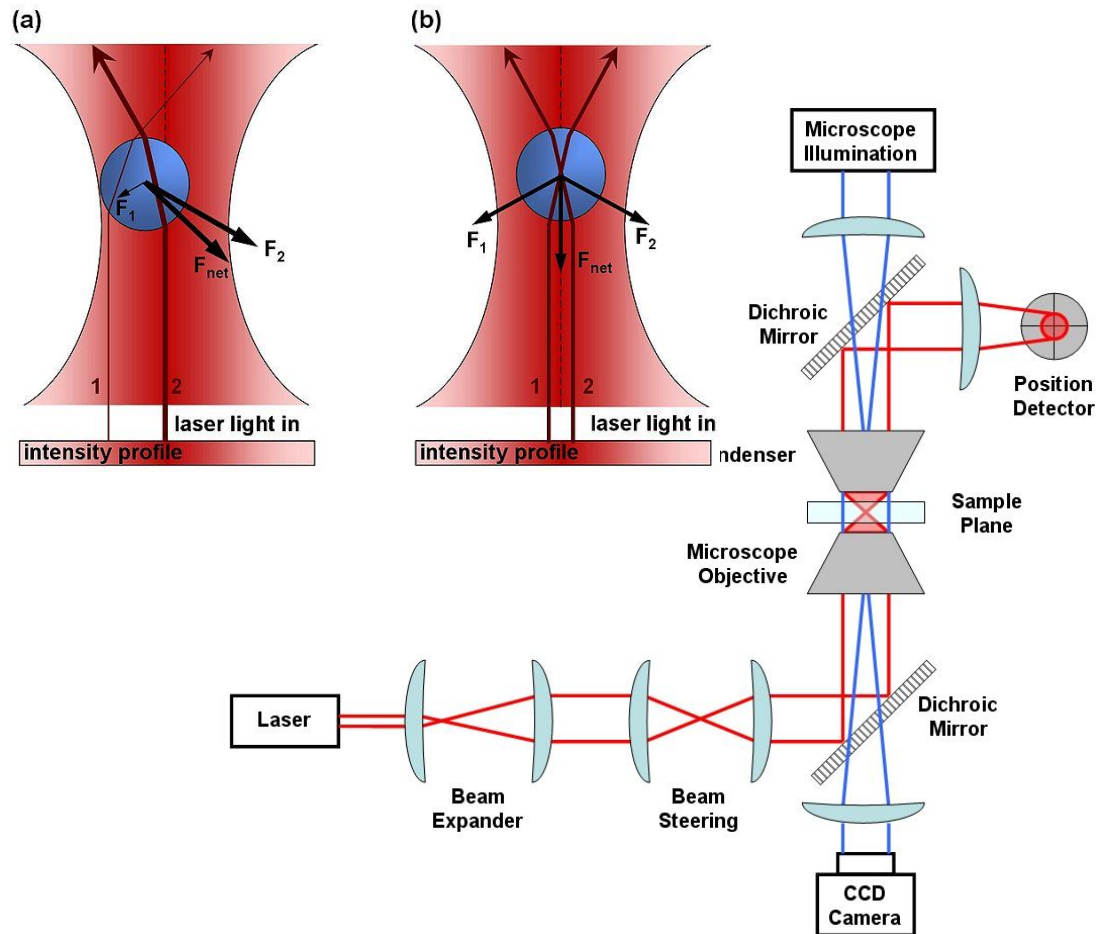


# Razvijmo protein, poglejmo rast membranske domene



**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.

# Slap nas ne pusti iz stržena - Optična pinceta



# Kako vlečejo molekularni motorji?

