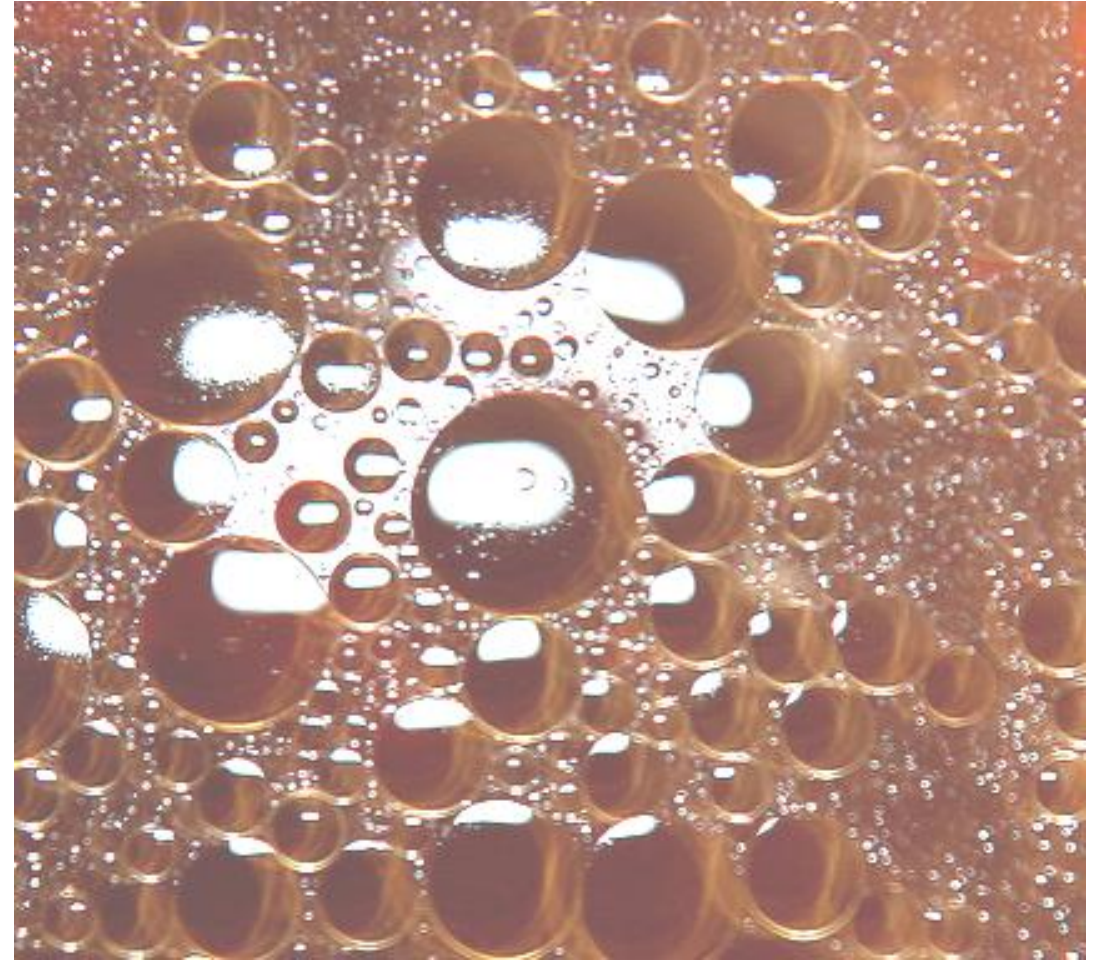
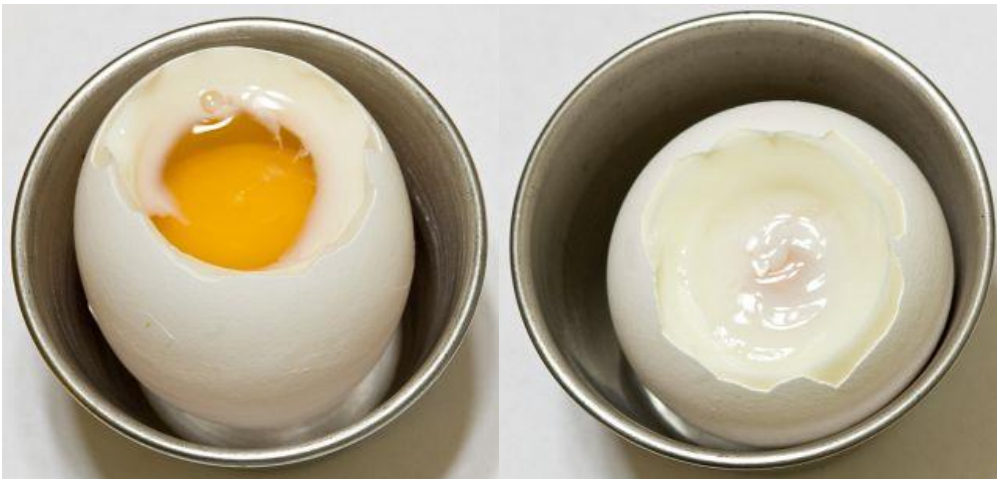


Termodinamika na molekularni ravni

Kaj se dogaja z molekulami med kuhanjem?

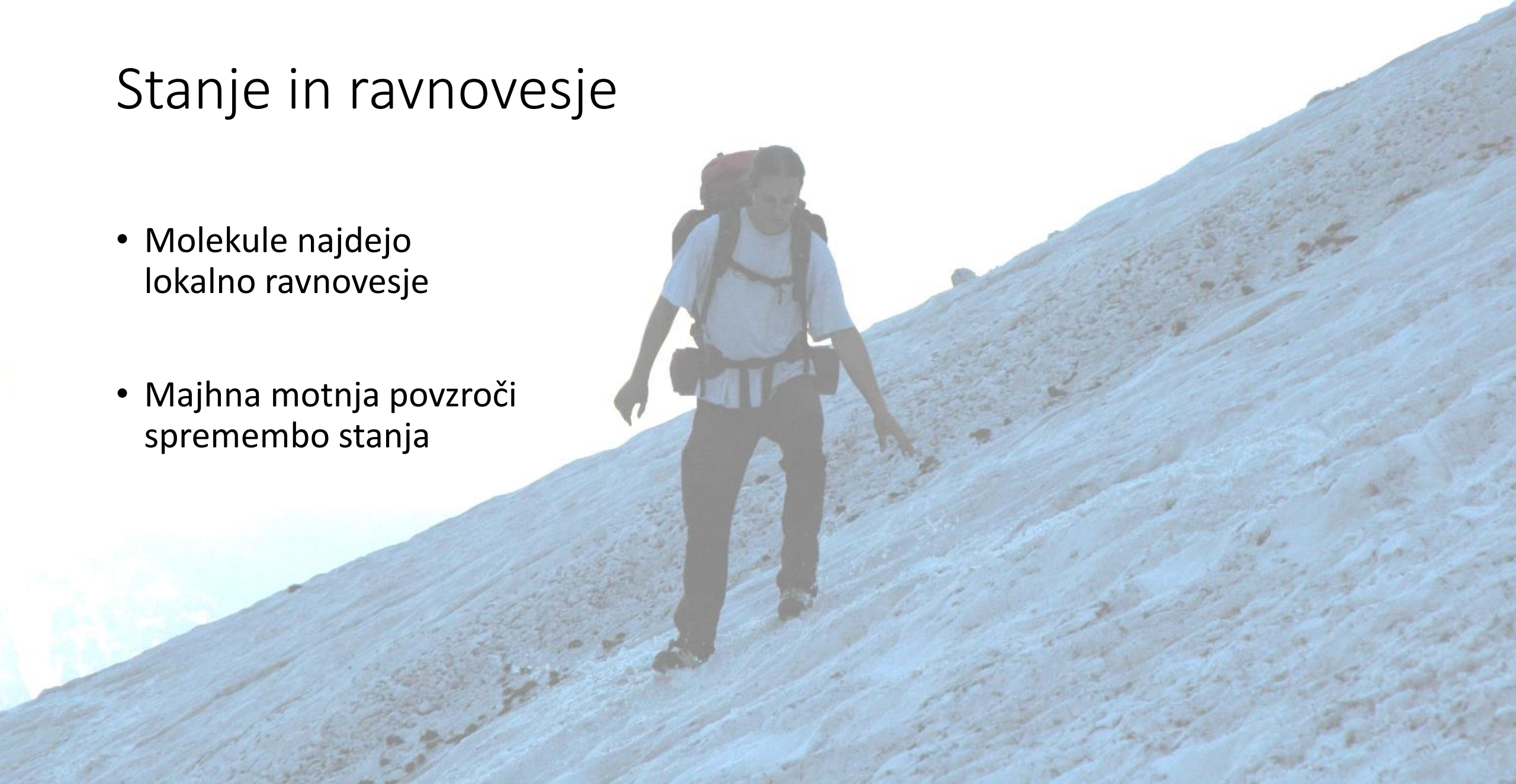
Ko dovajamo energijo,
dvigujemo temperaturo in
posledično spreminjamo

- strukture molekul
- porazdelitev molekul

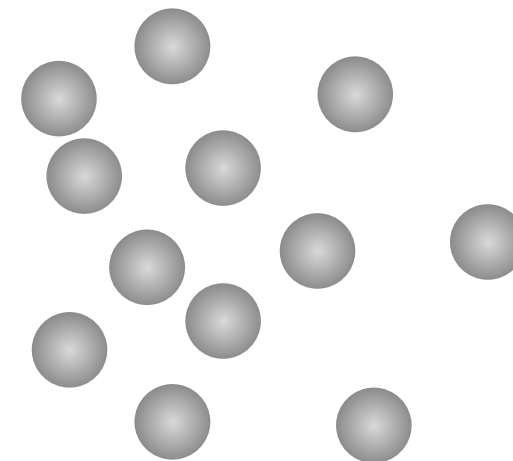
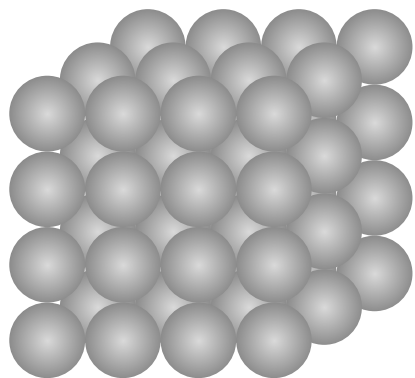


Stanje in ravnovesje

- Molekule najdejo lokalno ravnovesje
- Majhna motnja povzroči spremembo stanja



V čem se razlikujejo stanja?



↑ entropija

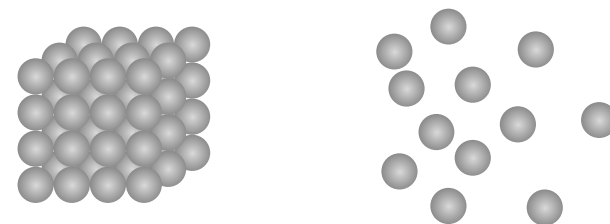
↓ energija

Kam se razvijajo stanja?

- Določa **prosta energija** (G):
(pri stalnem tlaku in temperaturi $\Delta H = \Delta E$)

$$G = E - TS$$

$$G = E - N_A k_B T \ln(P)$$



- Procesi spontano potekajo
v smeri nižje proste energije:

$$\Delta G < 0$$

$$\Delta E - T\Delta S < 0$$



- V ravnovesju je prosta energija sistema najnižja.

G ... prosta entalpija (angl. *Gibbs free energy*)

H ... entalpija ($H = E + pV$)

E ... energija

T ... absolutna temperatura

S ... entropija

P ... število stanj sistema

k_B ... Boltzmannova konstanta

($1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 8,6 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$)

Tudi v ravnovesju ni vse homogeno

- Molekule so lahko v različnih stanjih z enako prosto energijo:

$$\begin{aligned} G_1 &= G_2 \\ E_1 - TS_1 &= E_2 - TS_2 \end{aligned}$$

- Porazdelitev verjetnosti stanj p_i (*Boltzmannov faktor*):

$$p_i \propto e^{-E_i/kT}$$

- Razmerje verjetnosti:

$$\frac{p_1}{p_2} = e^{-\Delta E/kT}$$

Življenjski čas molekularnih struktur

- Razmerje verjetnosti stanj = razmerje življenjskih časov (τ):

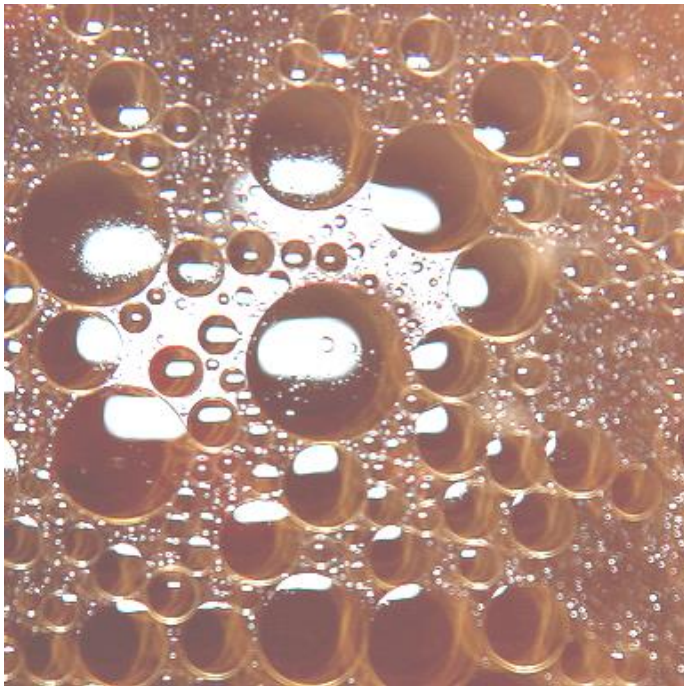
$\downarrow E \dots \uparrow \tau$

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{\tau_1}{\tau_2} = e^{-\Delta E/kT}$$

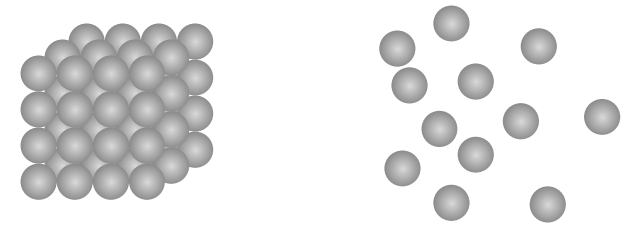
- V: Primerjaj življenjske čase naslednjih struktur:
 - H- in kovalentna vez
 - Enega, dveh, treh zavojev α -vijačnice proteinov
- Vsaka dodatna H-vez (0,1 eV) podaljša življenjski čas strukture za ~55x!

Temperatura spreminja porazdelitev stanj

izločanje maščobe iz
juhe pri ohlajanju

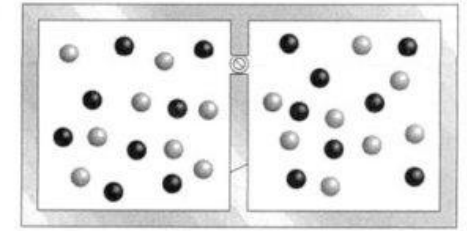
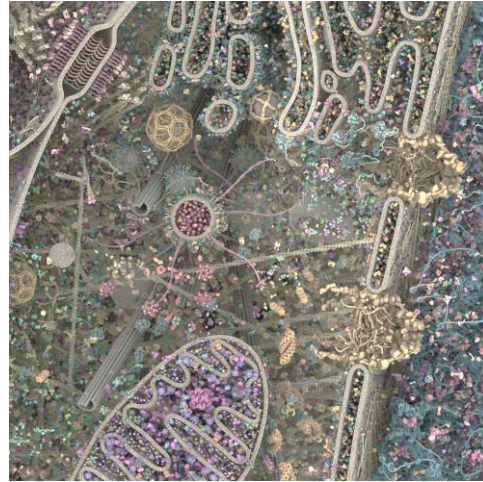
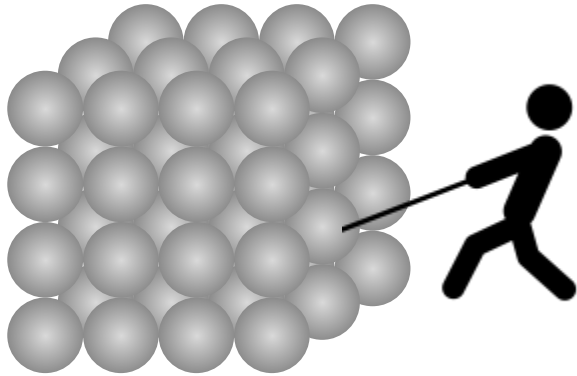


raztapljanje sladkorja pri
kuhanju marmelade

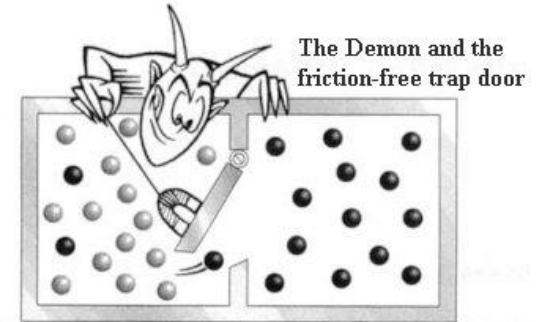


$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{\tau_1}{\tau_2} = e^{-\Delta E/kT}$$

Stacionarno stanje NI nujno tudi ravnovesje



System at Equilibrium

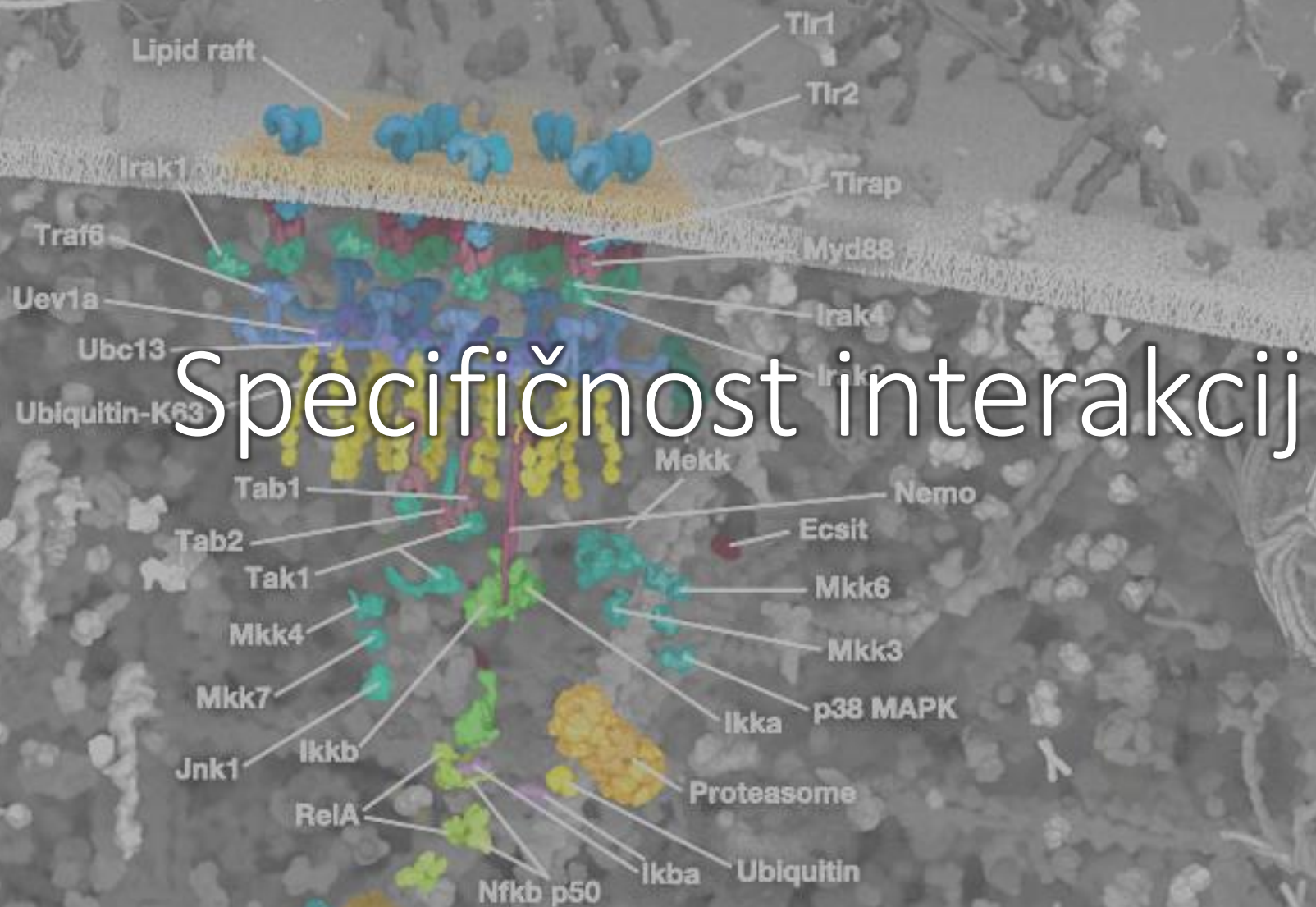


System with Lower Entropy
(in violation of the Second Law)

↓ energija

↑ entropija

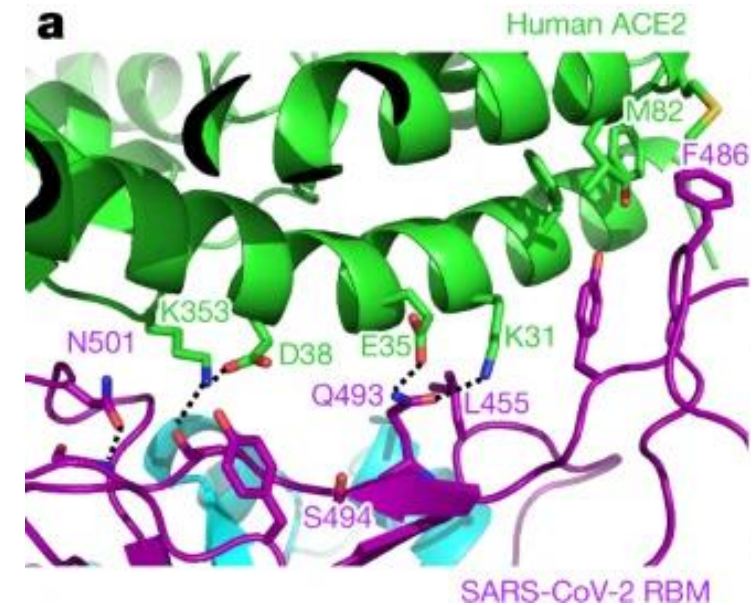
Vzdrževanje ravno pravega (ne)reda zahteva tok snovi in zato energijo



Kako se molekule “prepoznajo”?

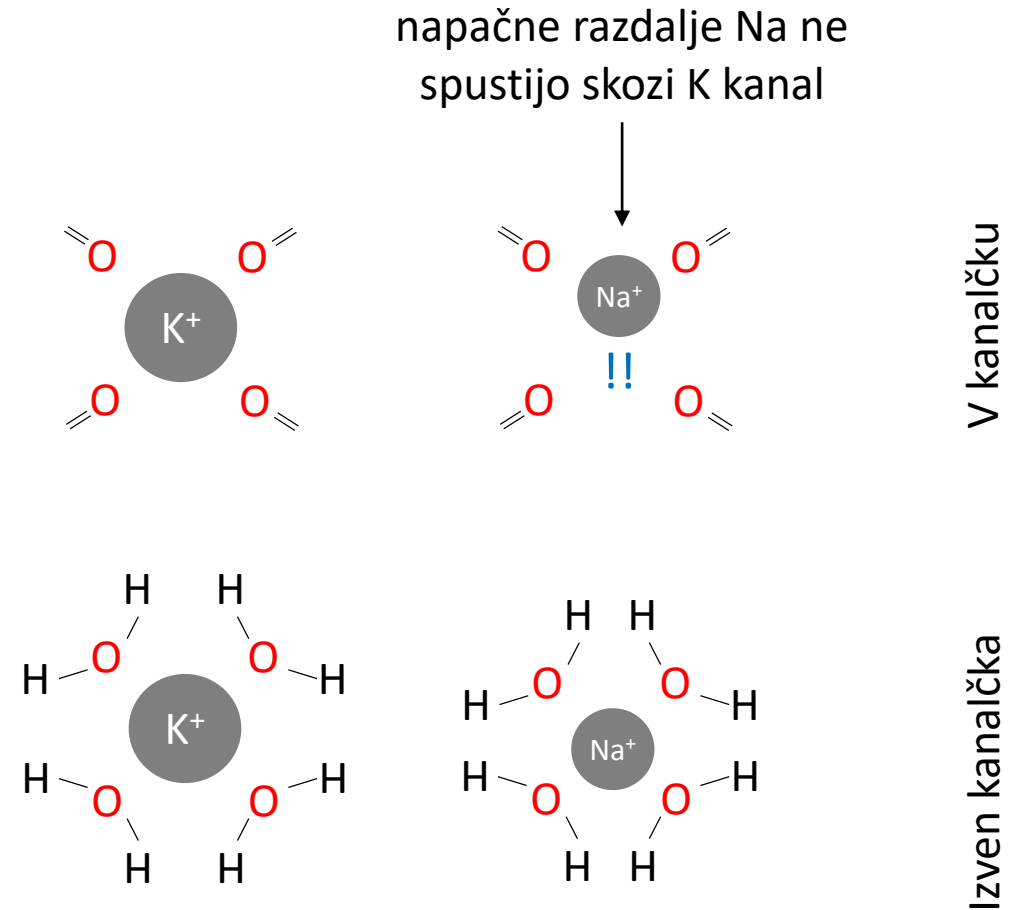
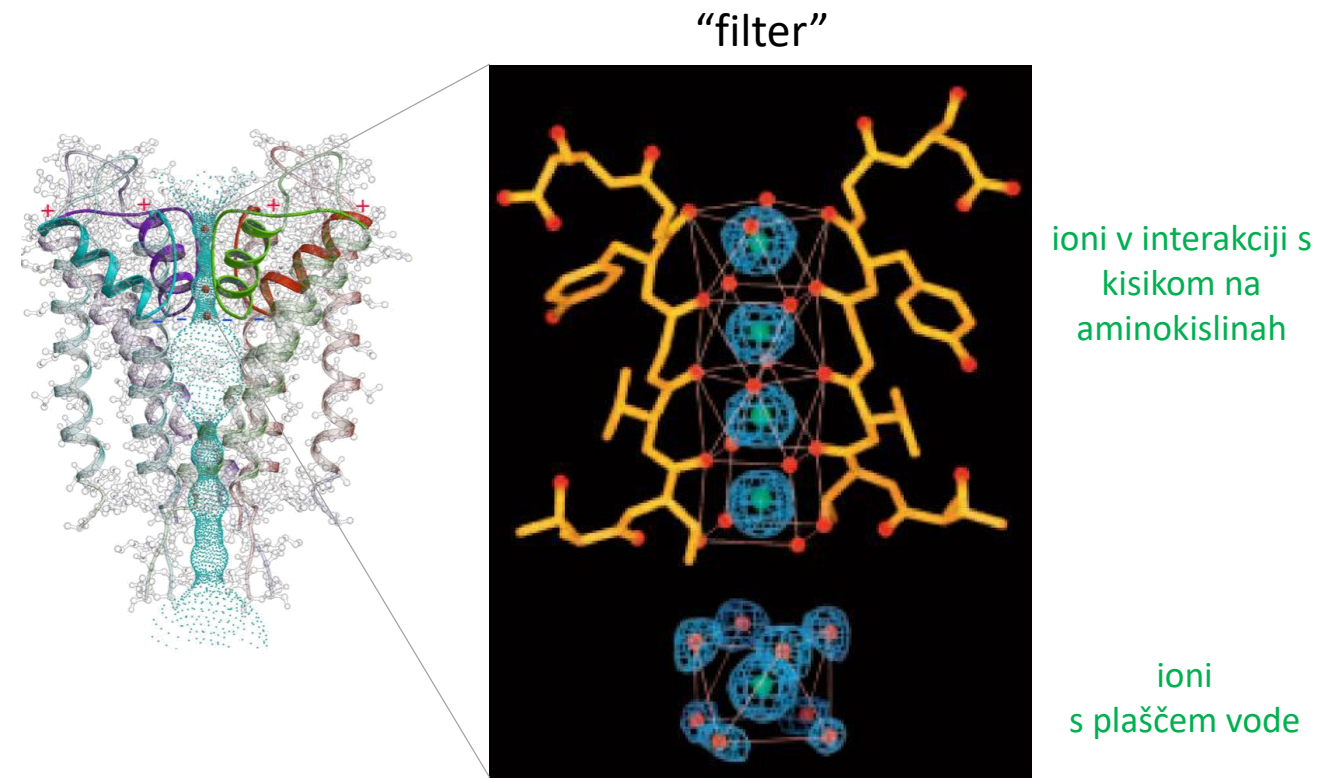
- Primeri:

- Receptor–ligand
- Encim–substrat
- Protitelo–antigen
- Transkripcijski faktor–DNA
- Ionski kanali
- Bazni pari DNA
- ...



- Konformacije interakcijskih motivov na pravem mestu in v pravi smeri
- Število šibkih vezi določa vezavni čas preko mnogo velikostnih redov (ps–Ms).

Specifičnost ionskega kanala



V: Ali lahko z energijo interakcij razložimo, zakaj Na ne more skozi K kanal?