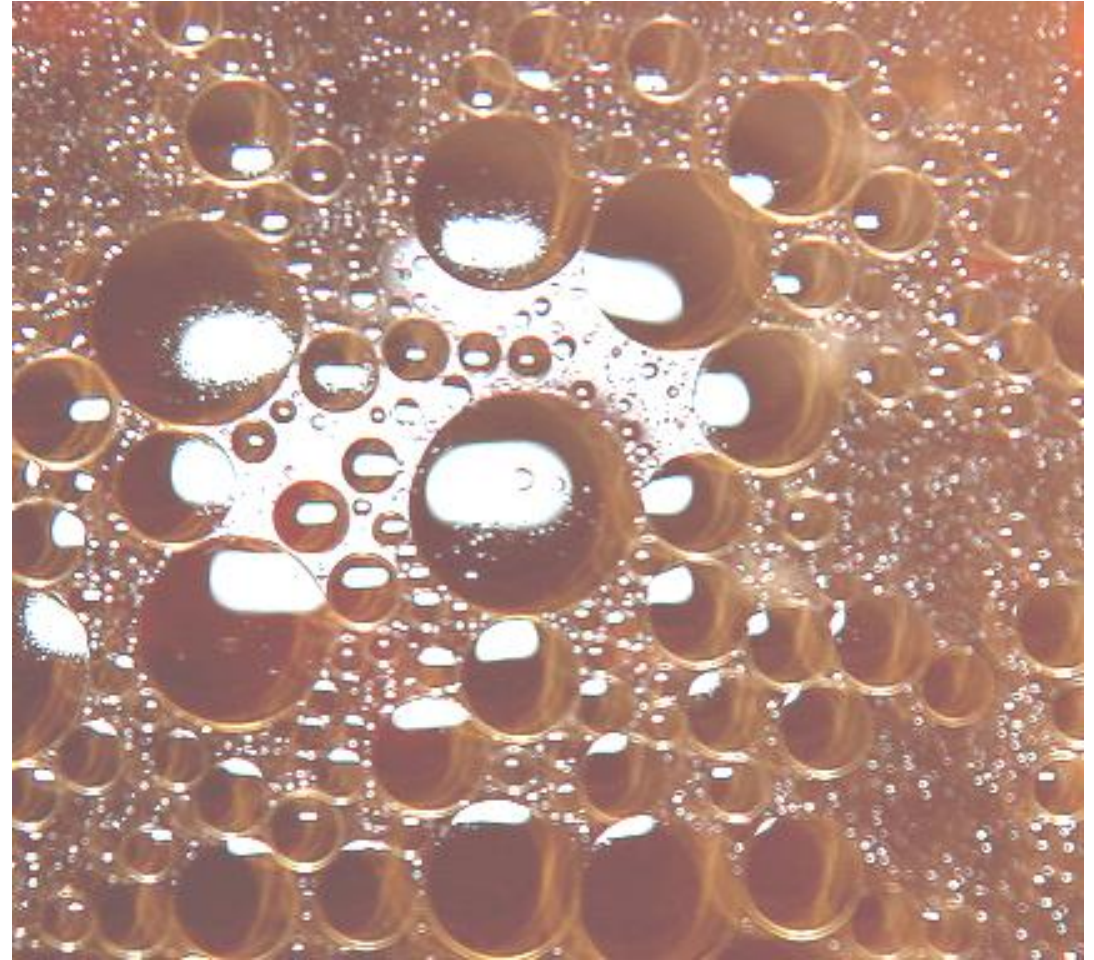
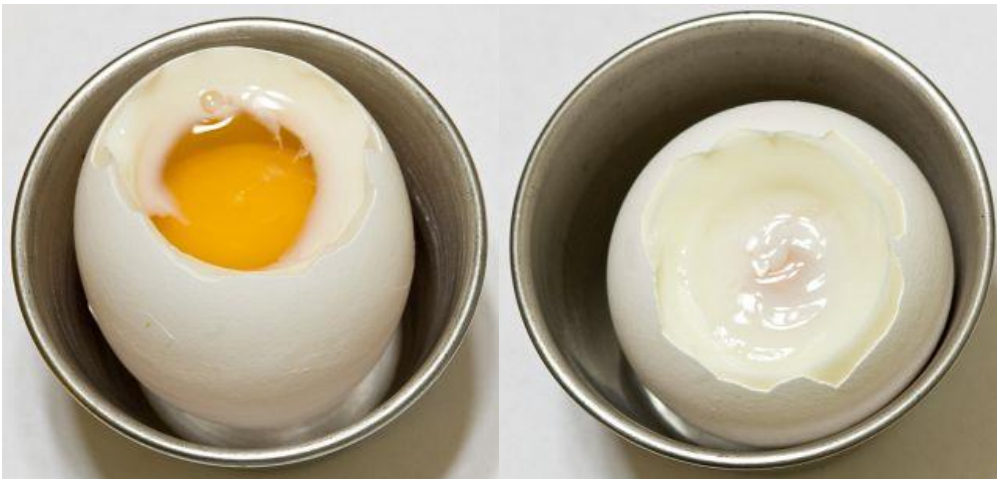


Termodinamika na molekularni ravni

Kaj se dogaja z molekulami med kuhanjem?

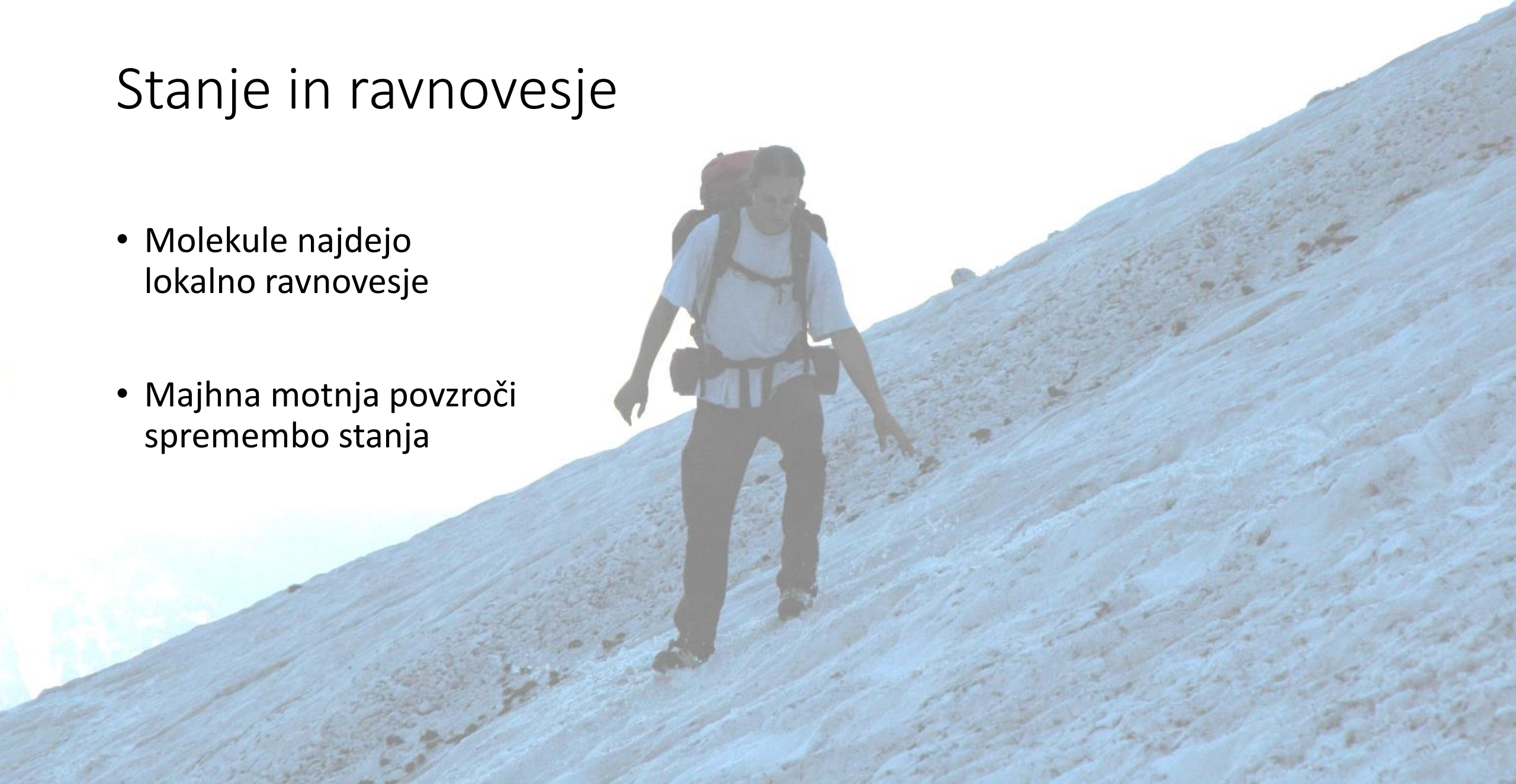
Ko dovajamo energijo,
dvigujemo temperaturo in
posledično spreminjamo

- strukture molekul
- porazdelitev molekul

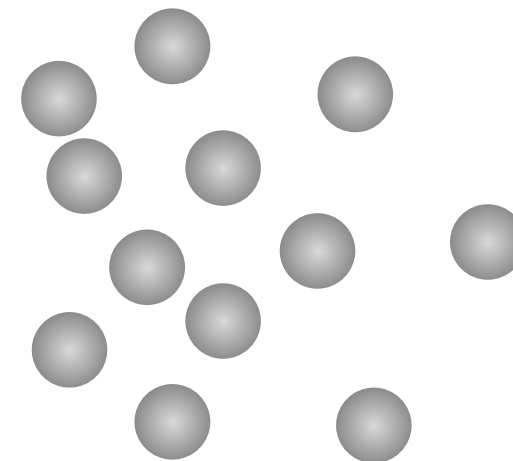
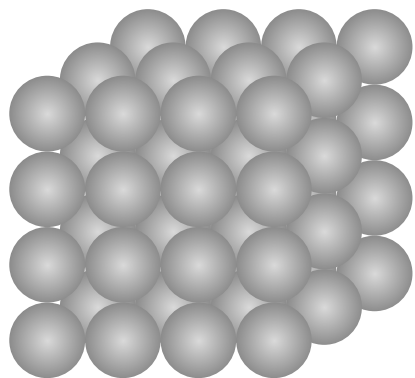


Stanje in ravnovesje

- Molekule najdejo lokalno ravnovesje
- Majhna motnja povzroči spremembo stanja



V čem se razlikujejo stanja?



↑ entropija

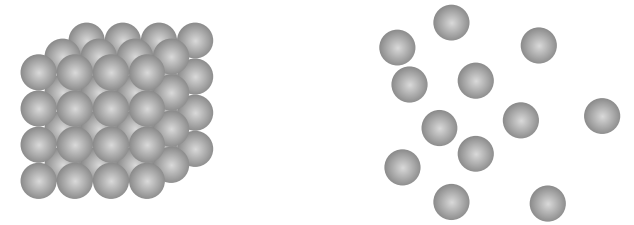
↓ energija

Kam se razvijajo stanja?

- Določa **prosta energija** (G):

$$G = E - TS$$

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



- Proti ravnovesju:

$$\Delta G < 0$$



G ... prosta energija

E ... energija (entalpija)

T ... absolutna temperature

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 enako

- 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):

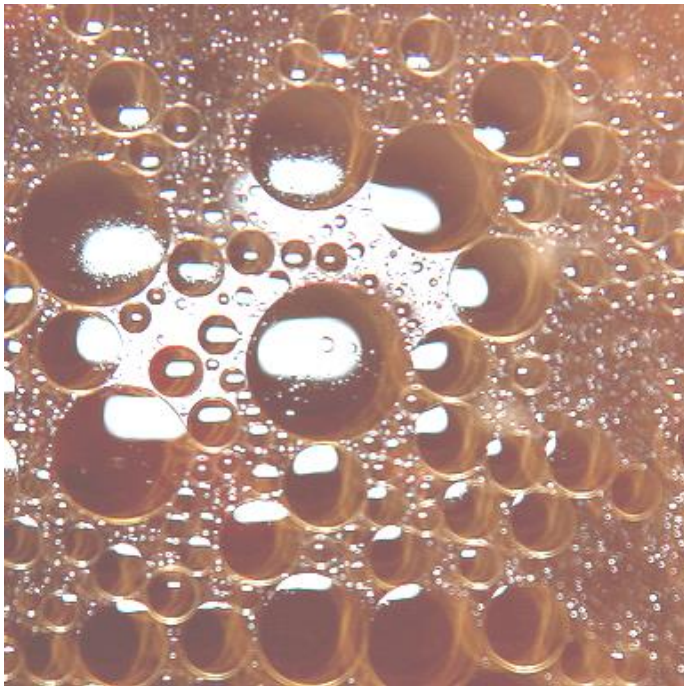
$\downarrow E \dots \uparrow \tau$

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

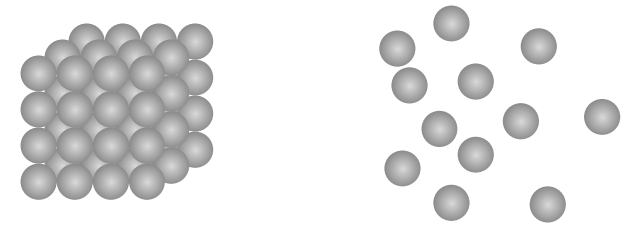
- Primeri:
 - H- in kovalentna vez
 - sekundarna struktura proteinov
- vsaka dodatna H-vez podaljša življenjski čas strukture za ~55x!

Temperatura spreminja porazdelitev stanj

izločanje maščobe iz
juhe pri ohlajanju

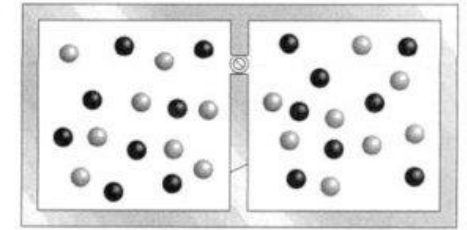
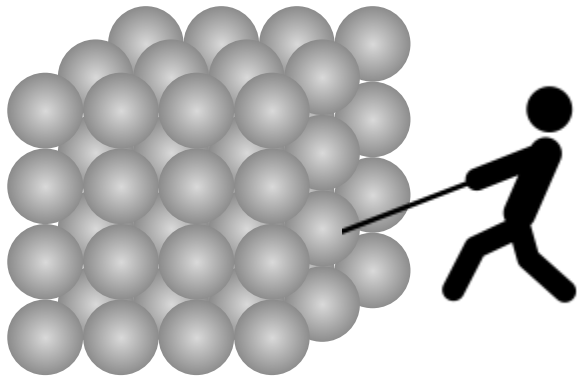


raztapljanje sladkorja pri
kuhanju marmelade

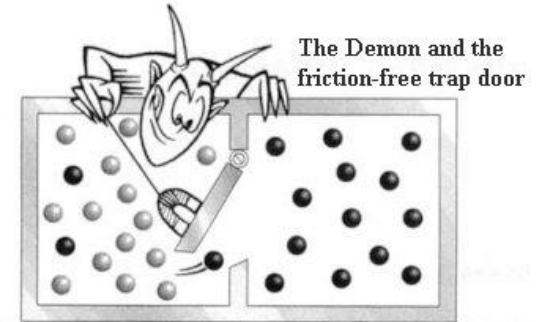


$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{\tau_1}{\tau_2} = e^{-\Delta E/kT}$$

Stacionarno stanje NI ravnovesje



System at Equilibrium



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

↓ energija

↑ entropija

Kako hitro pridemo iz enega stanja v drugo?

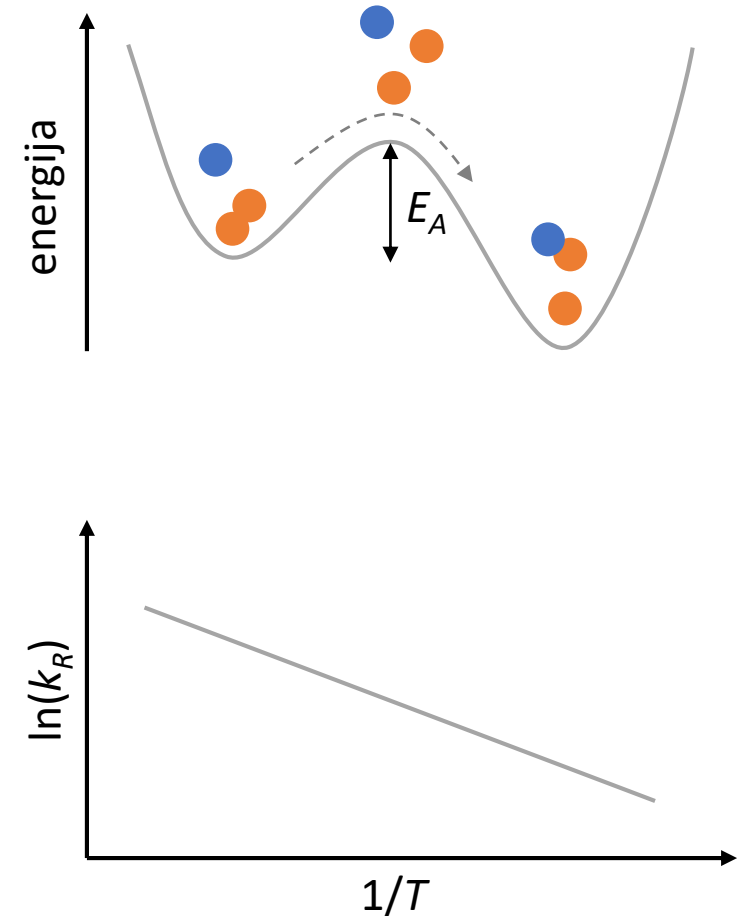
- Hitrost spremembe (npr. reakcije, k_R) je odvisna od verjetnosti vmesnega stanja (*Arrheniusova relacija*)

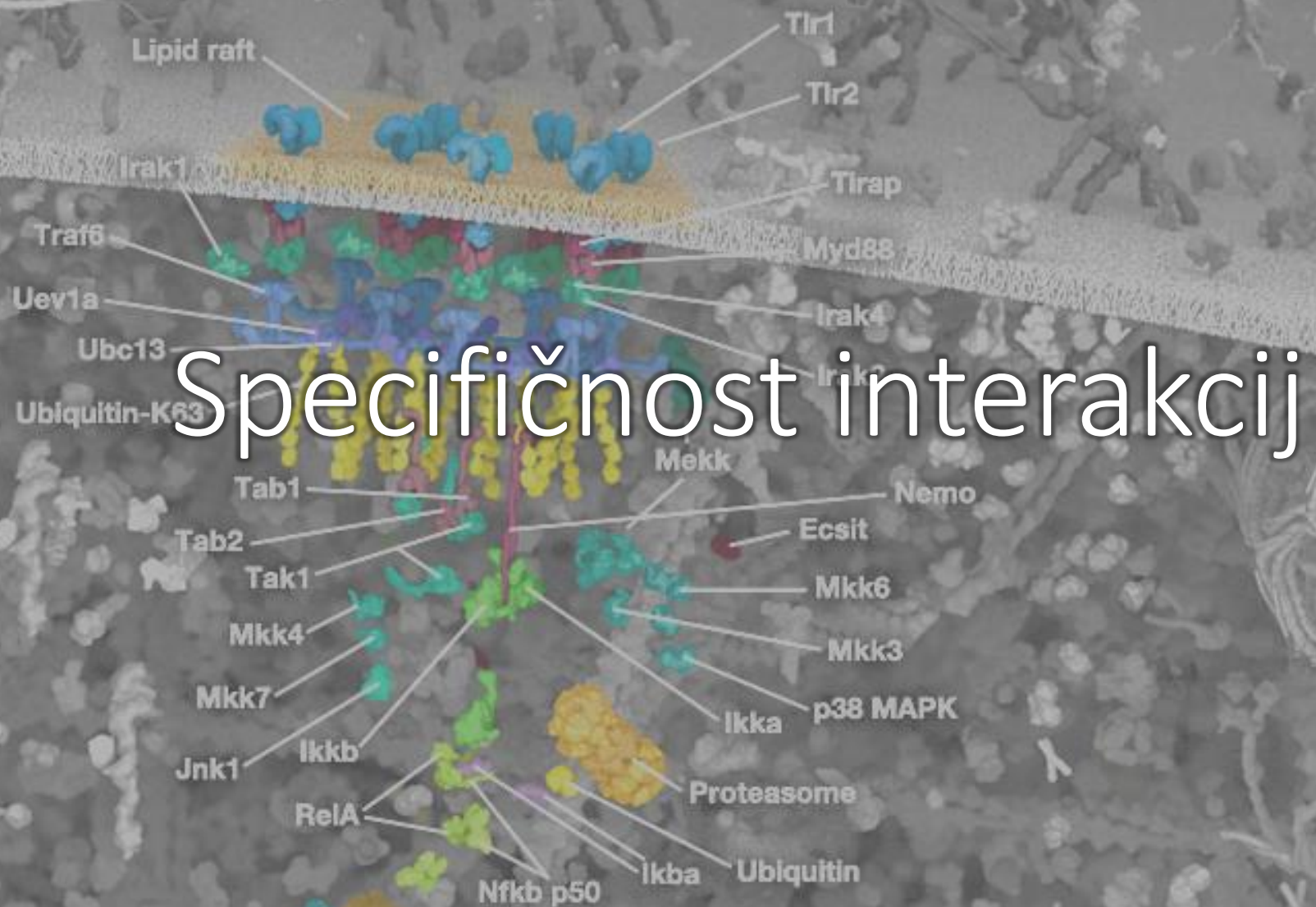
$$k_R = Ae^{-E_A/kT}$$

E_A ... aktivacijska energija

$$\ln(k_R) = \ln(A) - \frac{E_A}{k} \frac{1}{T}$$

- Celo v kompleksnih bioloških kaskadah reakcij hitrost navadno določa ena od reakcij

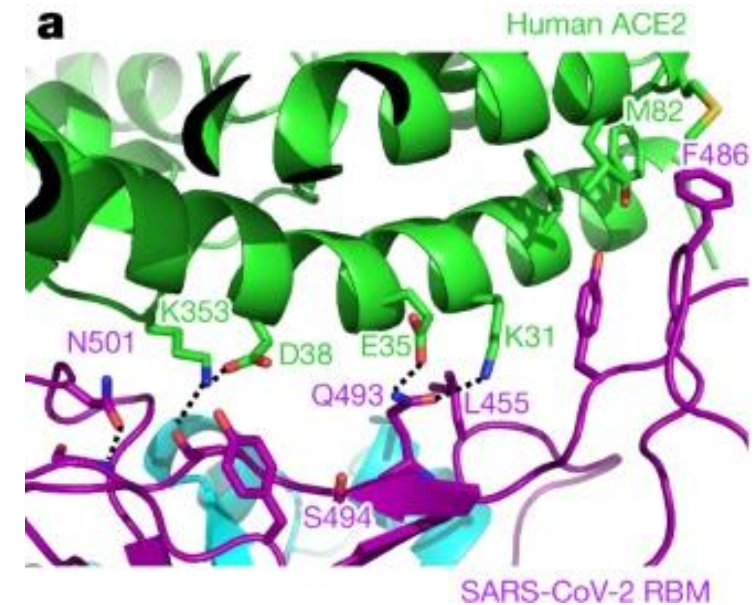




Kako se molekule “prepoznajo”?

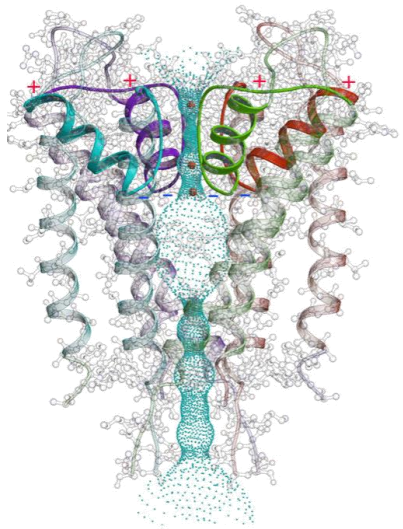
- Primeri:

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



- Konformacija interakcijskih motivov na pravem mestu in v pravi smeri

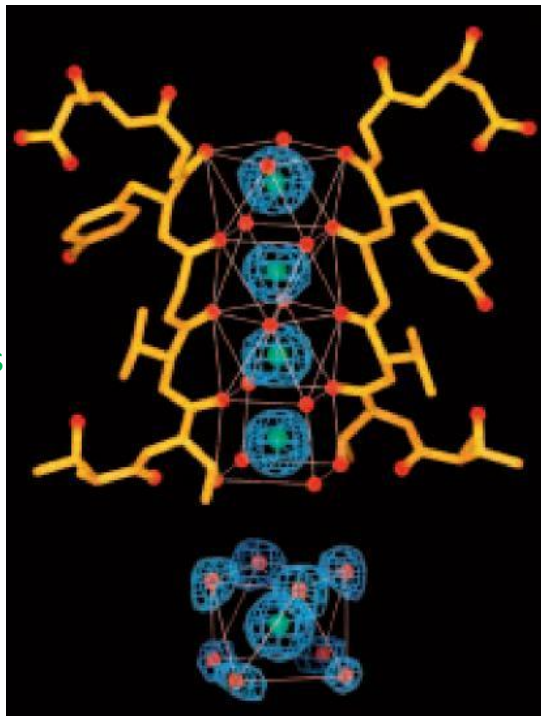
Specifičnost ionskega kanala



ioni v interakciji s
kisikom na
aminokislinah

ioni
s plaščem vode

“filter”



napačne razdalje Na ne
spustijo skozi K kanal

