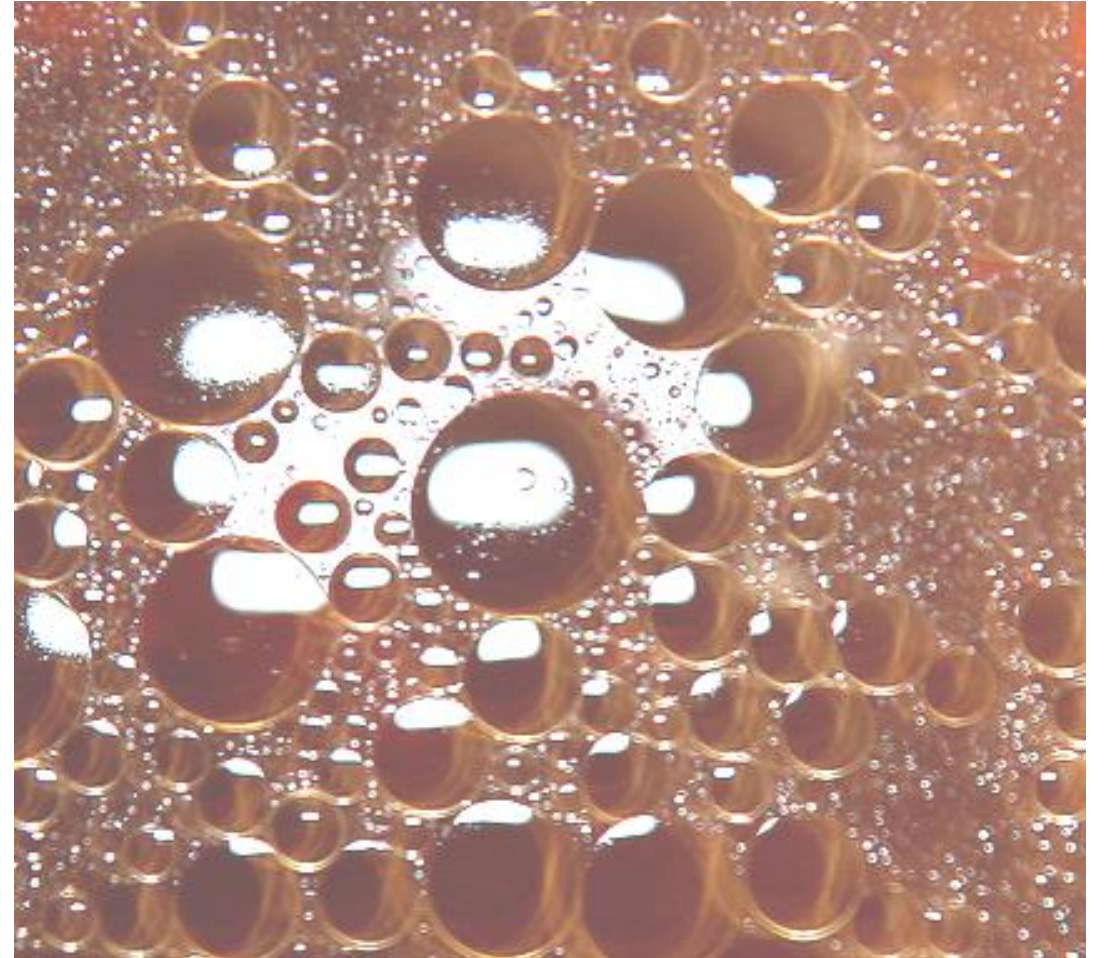
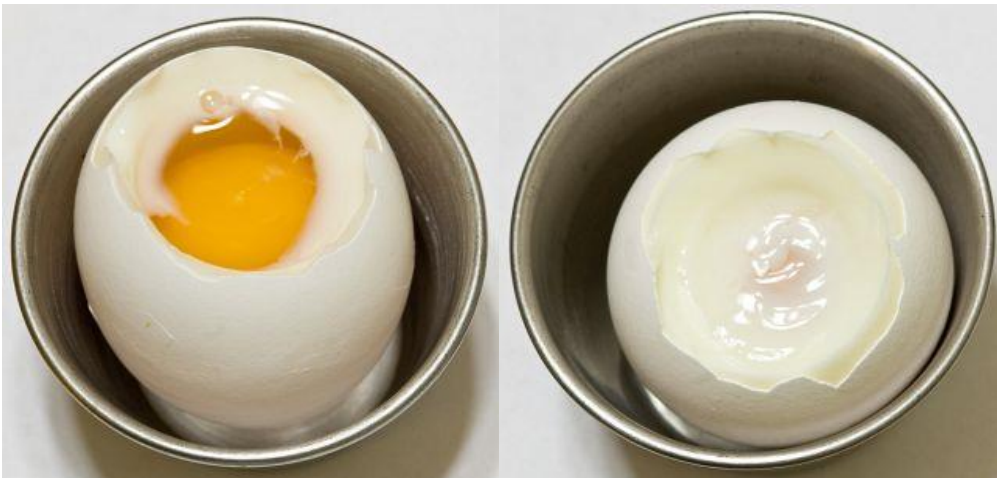


# Termodinamika na molekularni ravni

# Kaj se dogaja z molekulami med kuhanjem?

Ko dovajamo energijo,  
dvigujemo temperaturo in  
posledično spreminjamo

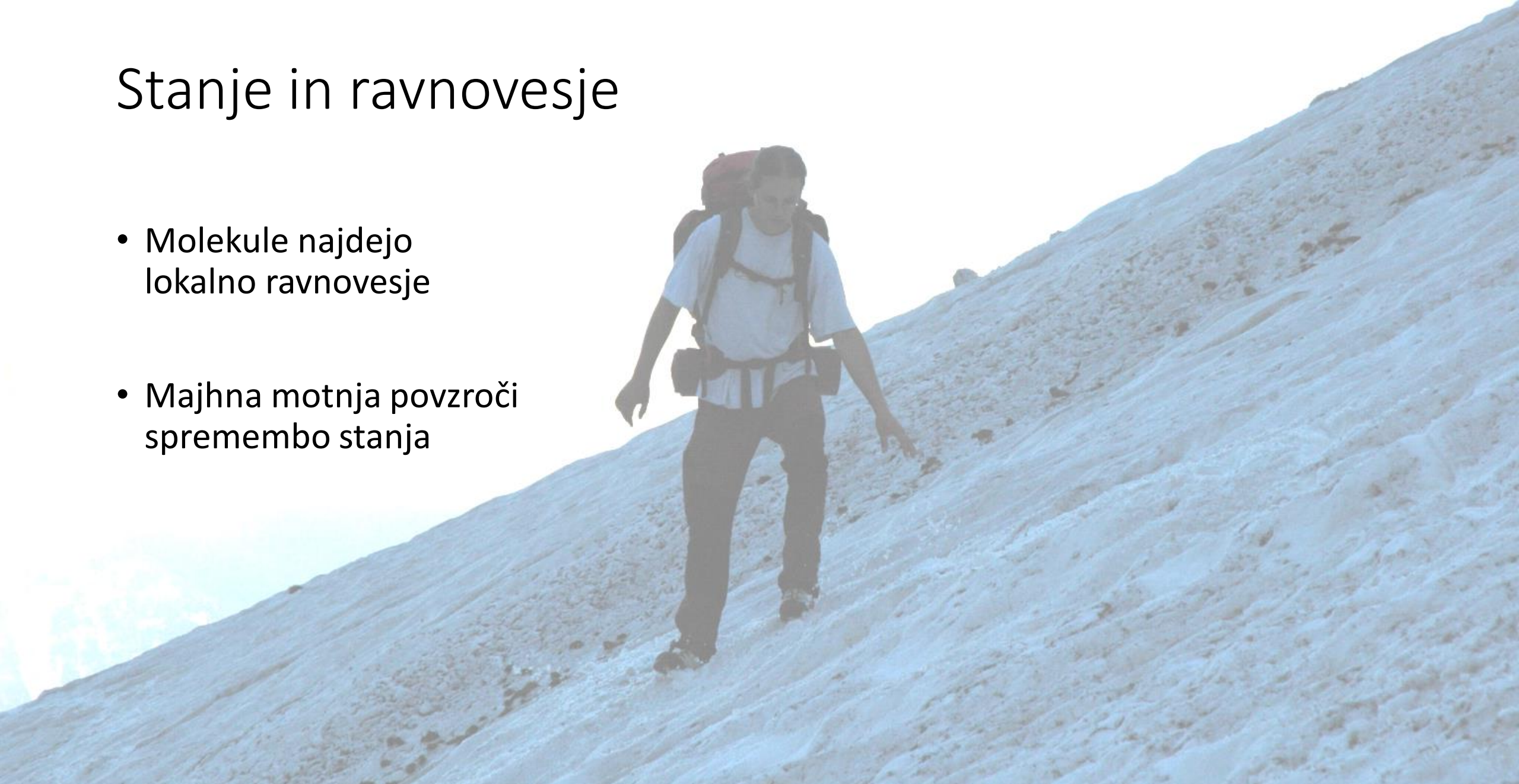
- strukture molekul
- porazdelitev molekul



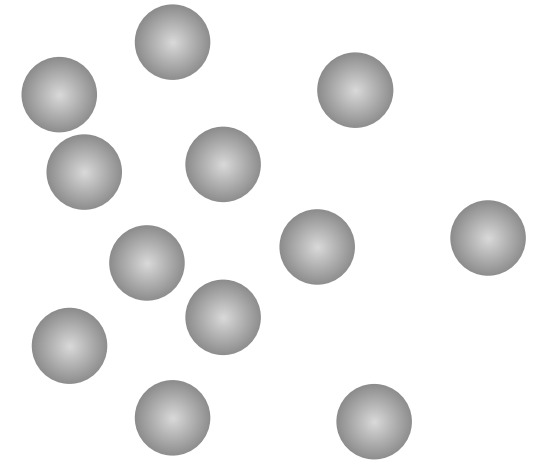
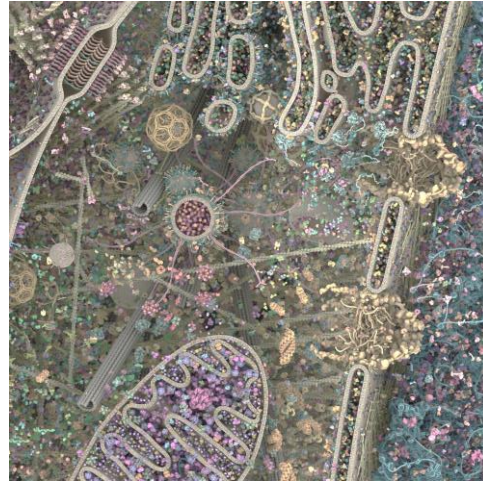
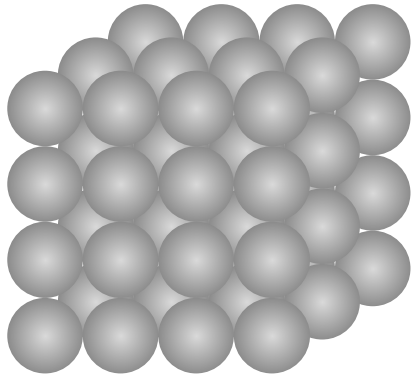


# Stanje in ravnovesje

- Molekule najdejo lokalno ravnovesje
- Majhna motnja povzroči spremembo stanja



# V čem se razlikujejo stanja?



↓ energija

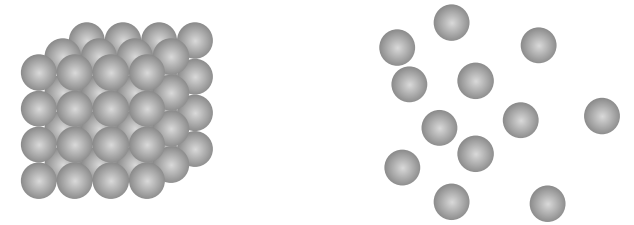
↑ entropija

# 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

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

# Tudi v ravnovesju ni vse homogeno

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

$$G_1 = G_2$$
$$E_1 - TS_1 = E_2 - TS_2$$

- 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 ( $\tau$ ):

$\downarrow E \dots \uparrow \tau$

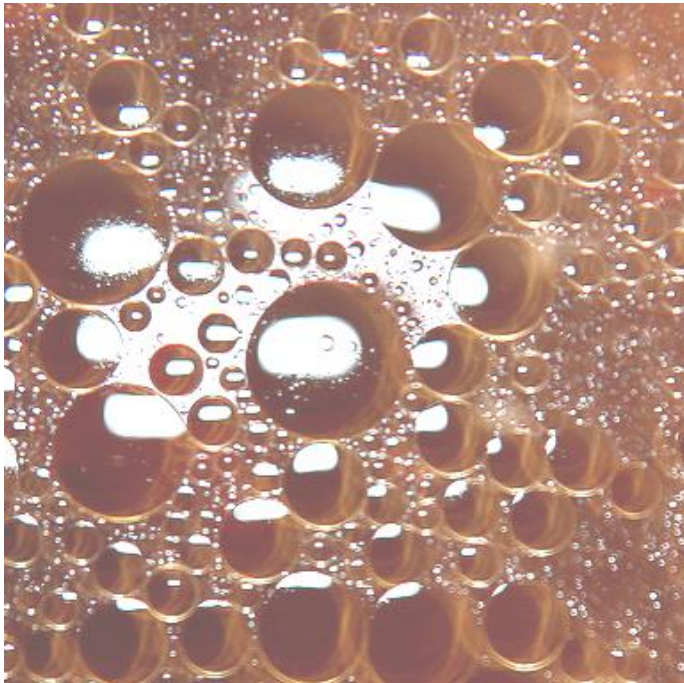
$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{\tau_1}{\tau_2} = e^{-\Delta E/kT}$$

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

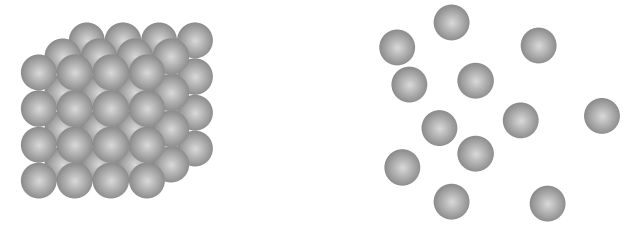


# Temperatura spreminja porazdelitev stanj

izločanje maščobe iz juhe pri ohlajanju



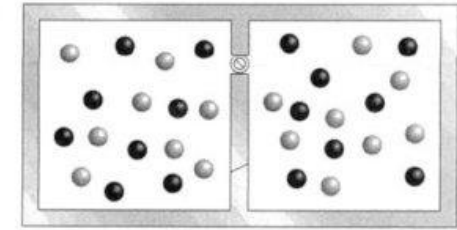
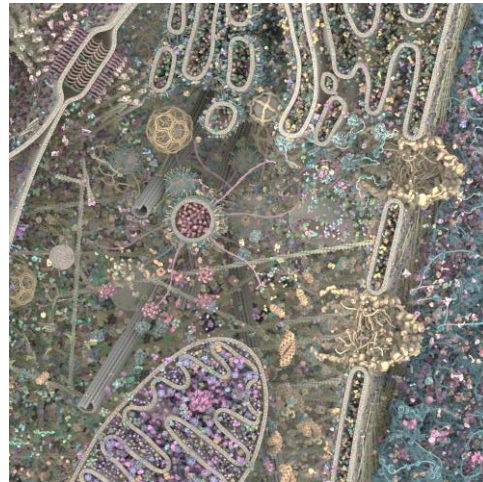
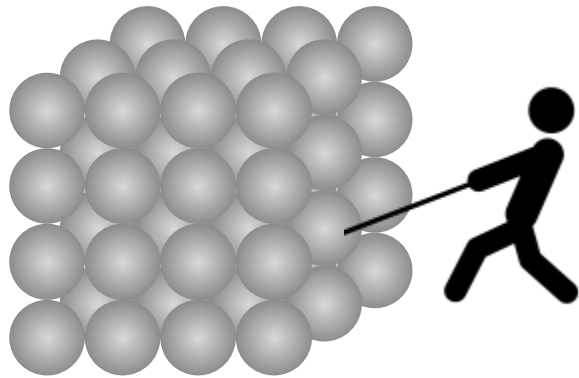
raztapljanje sladkorja pri kuhanju marmelade



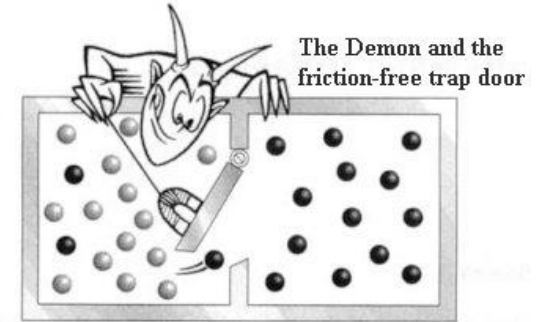
$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{\tau_1}{\tau_2} = e^{-\Delta E/kT}$$



# Stacionarno stanje NI nujno tudi ravnovesje



System at Equilibrium



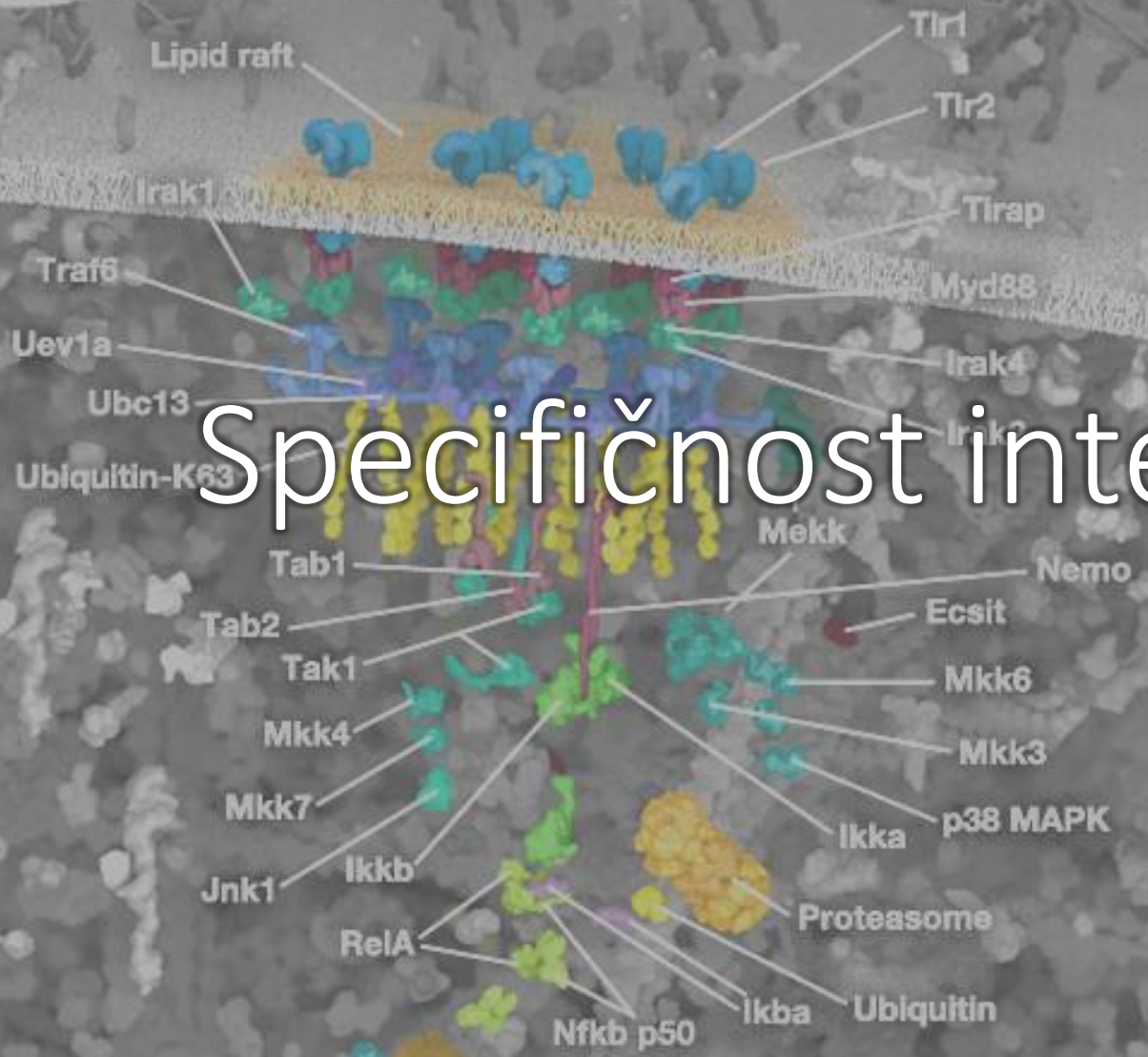
System with Lower Entropy  
(in violation of the Second Law)

↑ entropija

↓ energija

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

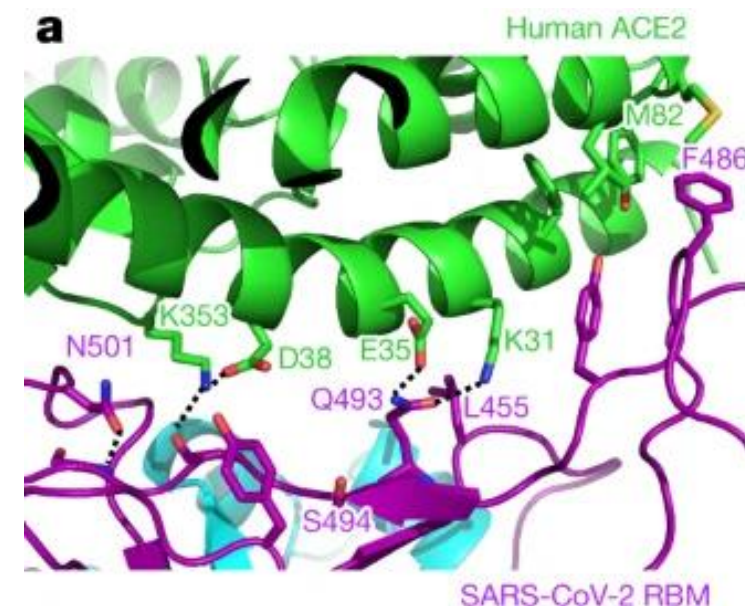
# Specifičnost interakcij



# Kako se molekule “prepoznajo”?

- Primeri:

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

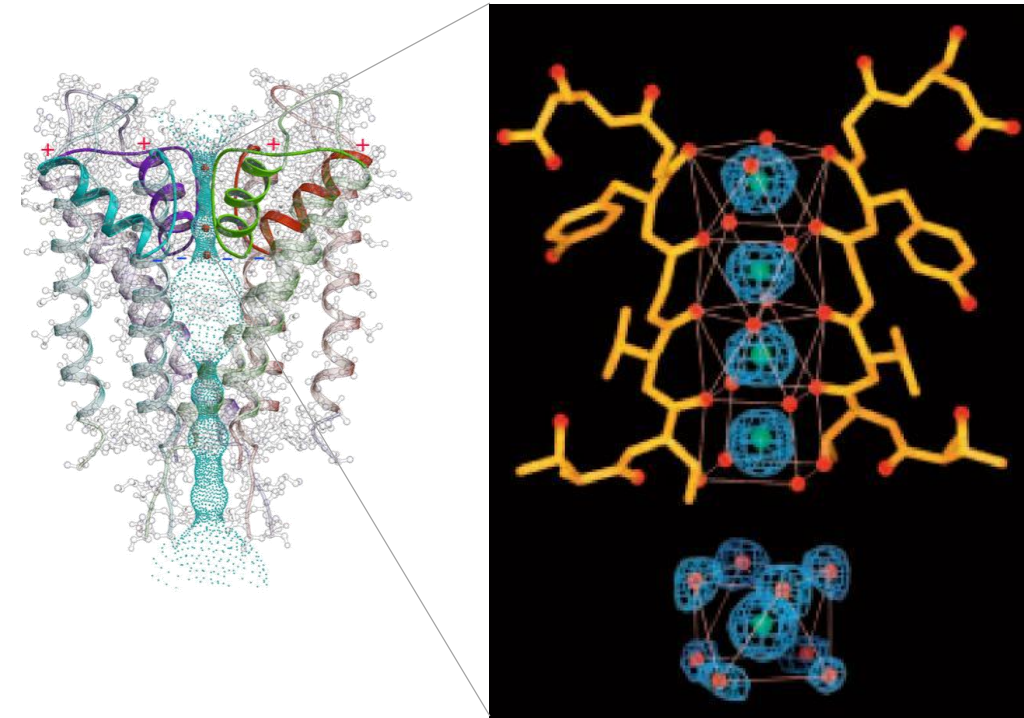


- Konformacije interakcijskih motivov na pravem mestu in v pravi smeri
- Število šibkih vezi določa vezavni čas preko mnogo velikostnih redov (ps–Ms).



# Specifičnost ionskega kanala

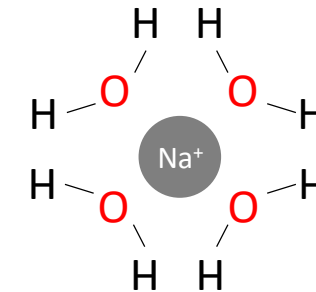
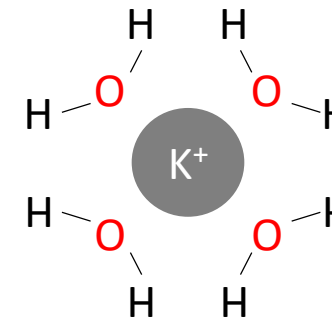
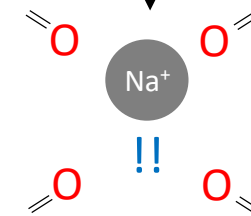
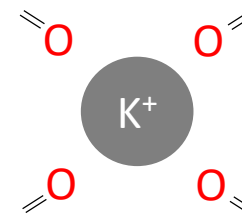
“filter”



ioni v interakciji s kisikom na aminokislinah

ioni s plaščem vode

napačne razdalje Na ne spustijo skozi K kanal



V kanalčku

Izven kanalčka

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