

Medzimolekulové slabé sily

1 **Coulombove sily** - sily medzi bodovými nábojmi q_1 a q_2

$$F_{cc} = \frac{q_1 q_2}{(4\pi\epsilon_0)r^2}$$

platí pre iónové väzby, interakcia bodových nábojov (anorganické skupiny bielkovín, nukleových kyselín)

Medzimolekulové slabé sily

2 Nábojové – dipólové sily - bodový náboj v blízkosti el. Dipólu

$$U_{c-dip} = \frac{q\vec{p} \cdot \vec{r}}{(4\pi\epsilon_0)r^3}$$

interakcia s molekulami s permanentným el. dipólovým momentom, resp. s molekulami, ktoré vo vode sú vo forme el. dipólu (napr. aminokyseliny). Vo vodnom prostredí je interakcia náboj – dipól tienená polarizovateľnosťou vody ($\epsilon_r \sim 80$). Dipóly menia svoj smer v dôsledku tepelných fluktuácií.

Medzimolekulové slabé sily

3 Van der Waalsove sily

Sily krátkeho dosahu $1/r^7$, určujú objemové vlastnosti kondenzovaných látok, ako napr. povrchové napätie, viskozitu. Tieto sily sú ne-valenčné a teda ne-chemické.

(i) Dipól – dipólové sily
potenciálna energia sústavy dvoch interagujúcich dipólov

$$U_{dip-dip} = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)r^3} [\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2 - 3(\vec{p}_1 \cdot \vec{r})(\vec{p}_2 \cdot \vec{r})/r^2]$$

smery dipólov sa menia, tepelné fluktuácie, súbor náhodne orientovaných dipólov

$$\langle U_{dip-dip} \rangle = -\frac{2p_1^2 p_2^2}{3(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2 kTr^6} \quad \text{Keesamova energia}$$

Medzimolekulové slabé sily

3

Van der Waalsove sily

(ii) Induktívne sily

interakcia nepolárnej molekuly s el. dipólom alebo nábojom
indukovaný dipólový moment v elektrickom poli

$$\vec{P}_{ind} = \alpha \vec{E}$$

potenciálna energia induk. dipólu v el. poli

$$U_{ind} = -\frac{1}{2} \alpha E^2$$

pre interakciu s nábojom

$$U_{ind} = -\frac{1}{2} \frac{\alpha q^2}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2 r^4}$$

pre interakciu s dipólom

$$U_{ind} = -\frac{1}{2} \frac{\alpha p^2 (1 + 3\cos\vartheta)}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2 r^6}$$

Medzimolekulové slabé sily

3

Van der Waalsove sily

(iii) Disperzné sily

Medzimolekulová sila pôsobiaca medzi dvoma neutrálnymi molekulami. Teória rozpracovaná F. Londonom (Londonove interakcie). Interakcia – spriahnuté dva kvantovo-mechanické dipólové oscilátory.

interakčná energia

$$U_{ind} = \frac{3hf_0}{4(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{\alpha^2}{r^6}$$

f_0 - frekvencia harm. oscilátorov v základnom stave

Disperzné sily sú dostatočne účinné nielen na pritiahnutie molekúl, ale aj ich vzájomné zorientovanie. Účinok v rozsahu 0,2 – 10 nm.

Medzimolekulové slabé sily

3

Van der Waalsove sily

Van der Waalsova sila – príspevky všetkých 3 síl podľa typov molekúl, výsledkom je slabá príťažlivá sila medzi molekulami, ktorej potenciálna energia interakcie sa mení podľa $1/r^6$. Teória vychádza z párovej interakcie. V biologických systémoch je situácia zložitejšia, procesy sa odohrávajú vo vodnom prostredí. Okamžité elektrické pole vytvorené fluktujúcimi nábojmi polarizuje všetky okolité molekuly prostredia.

Vodíková väzba

väzba medzi dvoma atómami s vysokou elektronegativitou,
X – akceptor, Y – donor

X – H sa stáva polárnou vo forme $X^{\delta(-)} - H^{\delta(+)}$, vodík zostáva prakticky
protónom

označenie väzby X – H...Y, je to donorová – akceptorová interakcia
prostredníctvom vodíkového atómu.

Väzbová energia:

kovalentná väzba

niekoľko eV

vodíková väzba

menej než 1 eV, spravidla 0,13 až 0,31 eV

van der Waalsova väzba

max. 0,1 eV

tepelná energia pri izbovej teplote $k_B T = 25 \text{ meV}$