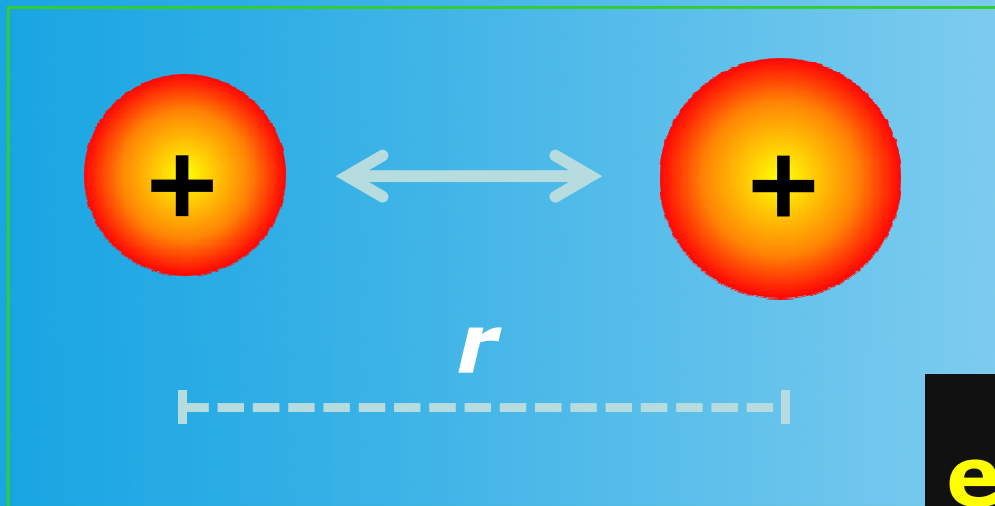


MEZIMOLEKULÁRNÍ INTERAKCE

(s využitím upravených diapozitivů z přednášky prof. Ing. Miloslav Pekaře, CSc
„Základní principy nanotechnologií“, VUT Brno)

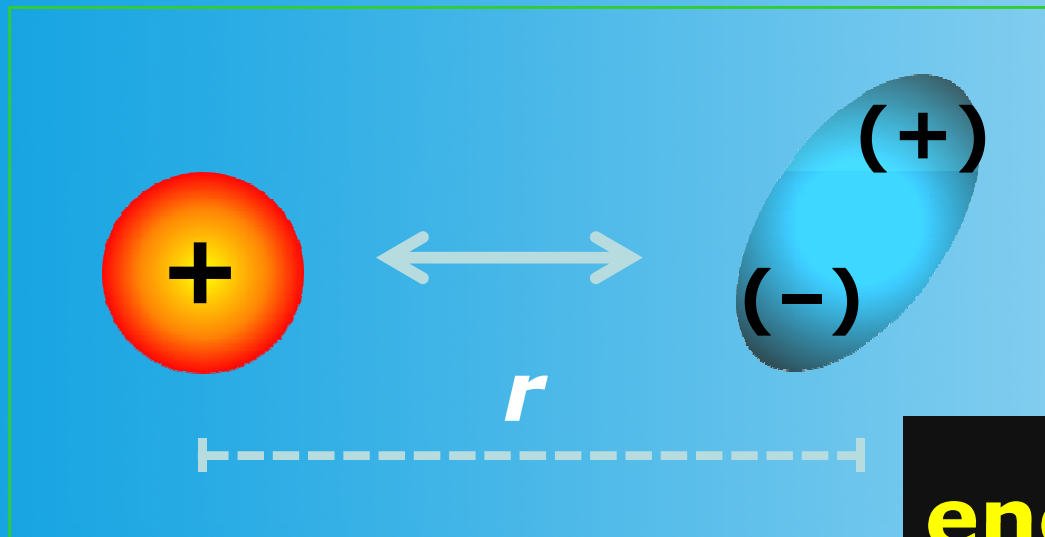
1. Interakce, při kterých se orbitály nepřekrývají

- částice se stálým nábojem
(ionty)
- klasická elektrostatika
(Coulombův zákon)



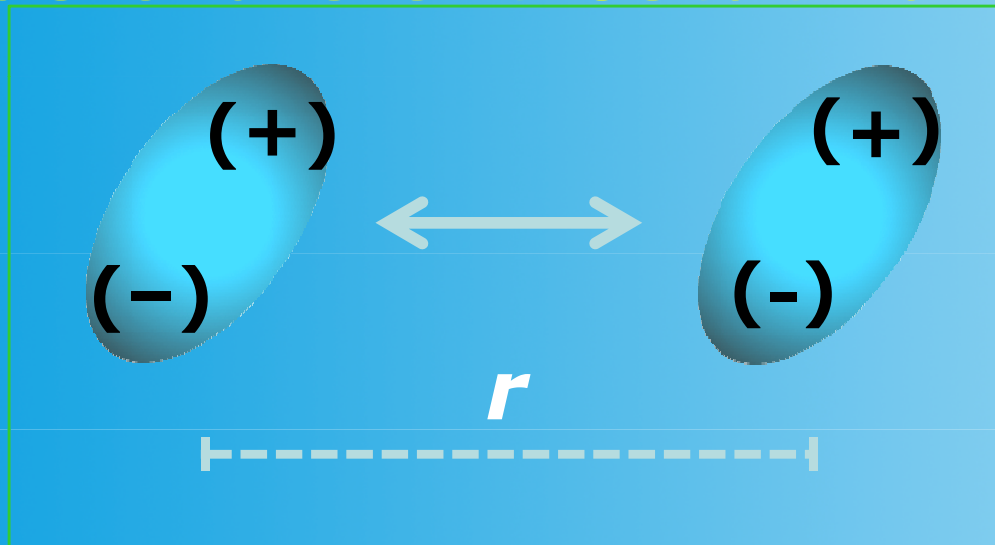
energie $\sim 1/r$

- jedna částice se stálým nábojem (ion) a druhá bez náboje, ale elektricky nevyvážená (polární)
- klasická elektrostatika



energie $\sim 1/r^2$

- částice bez náboje, ale elektricky nevyvážené (polární)
Keesomovy interakce
- klasická elektrostatika



energie $\sim 1/r^3$

Willem Hendrik Keesom
(1876-1956)

Dipólový moment

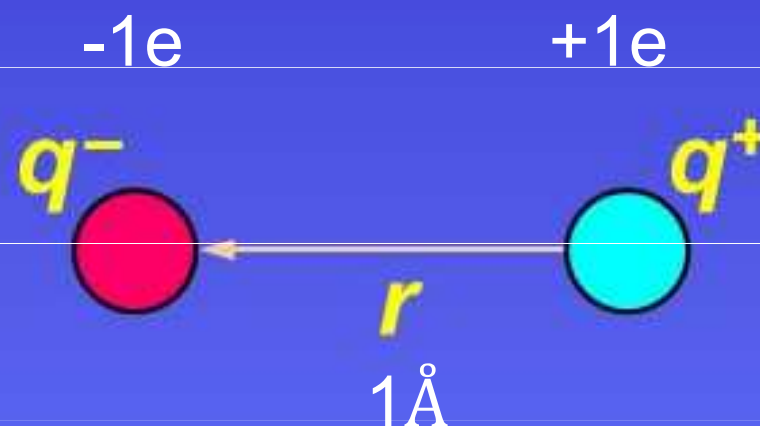
- kvantitativní vyjádření míry polarizace vazby
- měřitelná veličina

$$\mu_D = q e r$$

vazebný
dipól

$$\mu_D = \sum e q_i r_i$$

dipól
molekuly



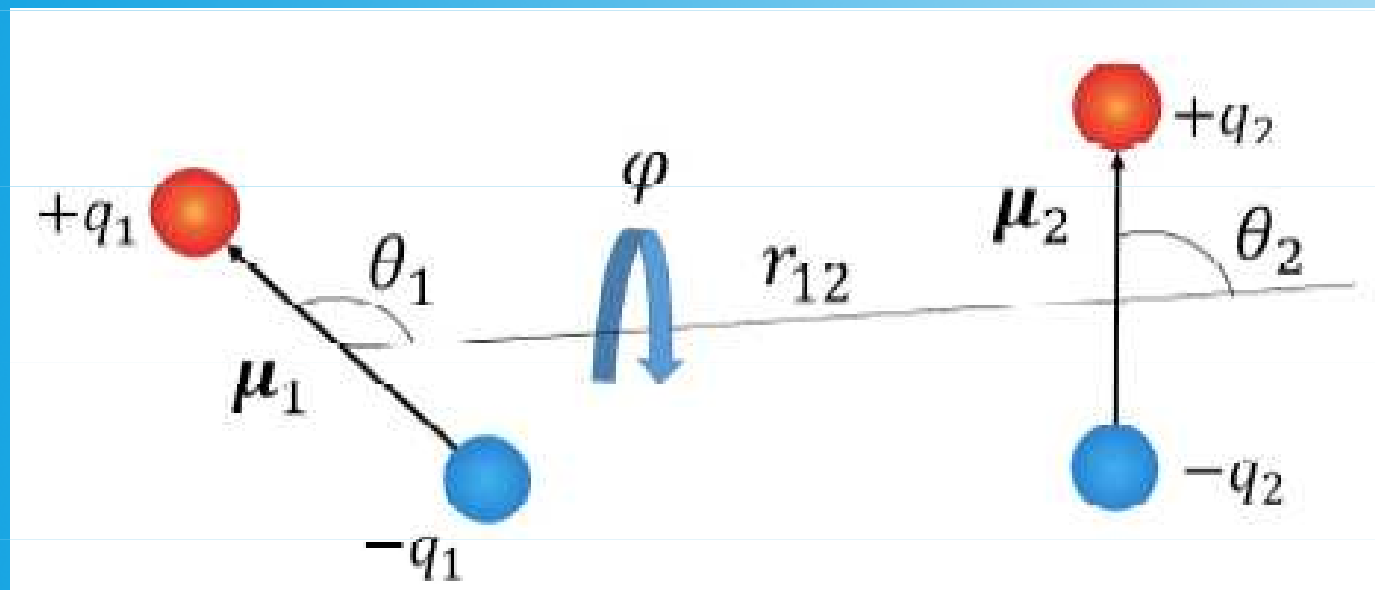
$$\mu = 4.803 \text{ D}$$

Jednotka dipólového momentu byla pojmenována po nositeli [Nobelovy ceny](#) za chemii v roce [1936](#), holandském fyzikálním chemikovi [Peteru Debyeovi](#), který se zabýval polárními molekulami

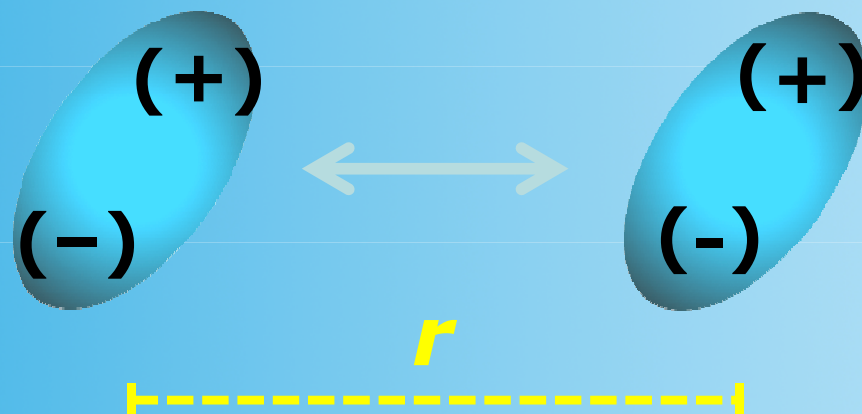
interakce dipól-dipól

Interakce dipól-dipól. Dvě molekuly s nenulovým dipólovým momentem na sebe působí interakční energií

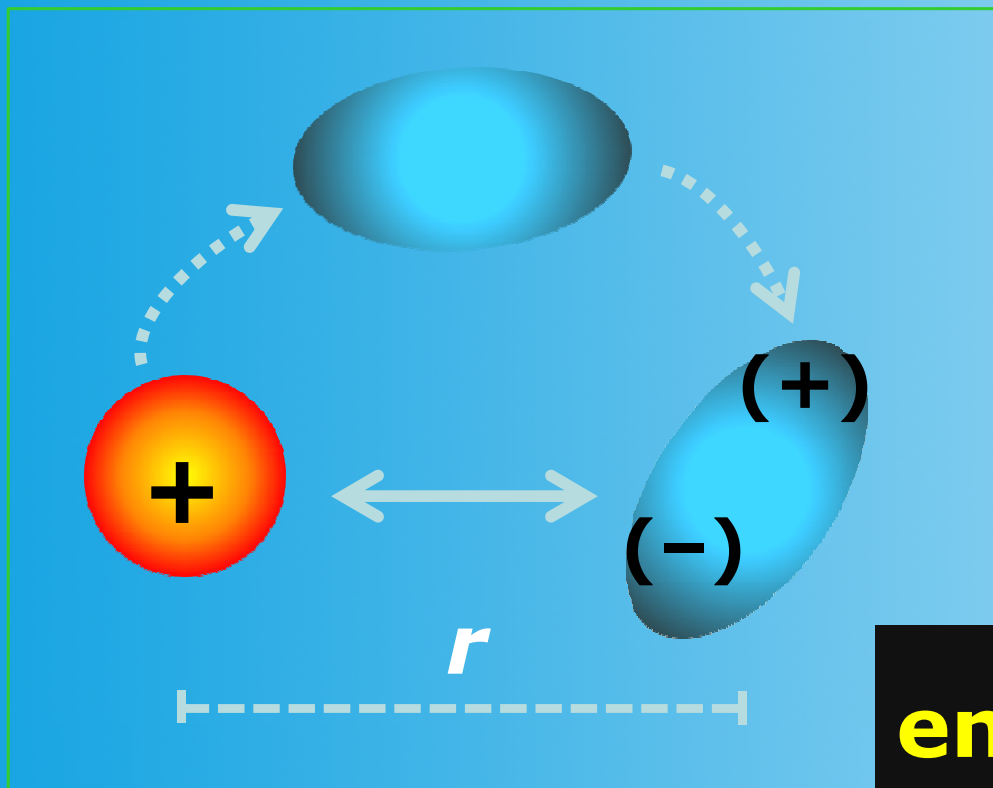
$$E_{int} = -\frac{\mu_i \mu_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}^3} (2 \cos \theta_i \cos \theta_j - \sin \theta_i \sin \theta_j \cos \varphi)$$



energie $\sim 1/r^3$

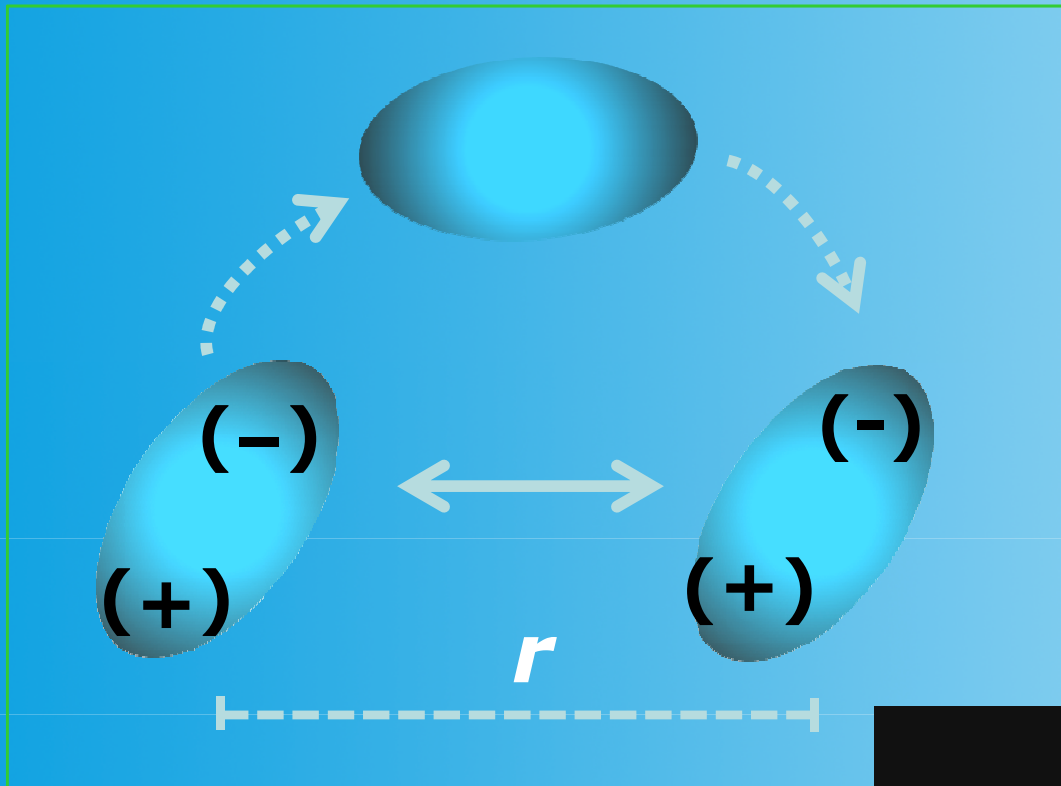


- ion elektricky „rozhodí“ původně nepolární molekulu = indukuje dipól
- klasická elektrostatika



energie $\sim 1/r^4$

- dipól elektricky „rozhodí“ původně nepolární molekulu = indukuje dipól
- klasická elektrostatika (Debye)

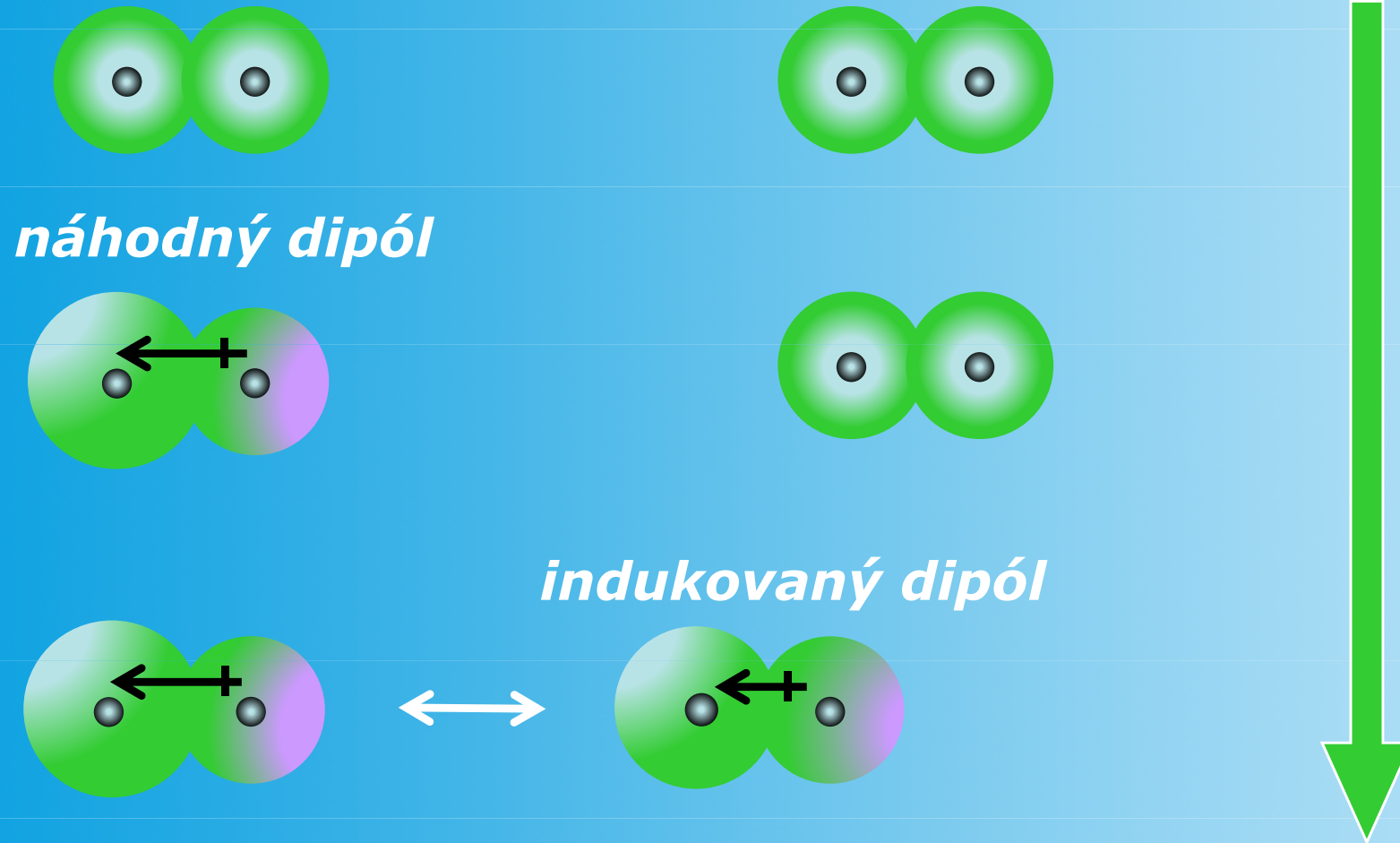


Peter Debye (1884-1966)

energie $\sim 1/r^6$

Interakce náhodný dipól-indukovaný dipól:

disperzní interakce

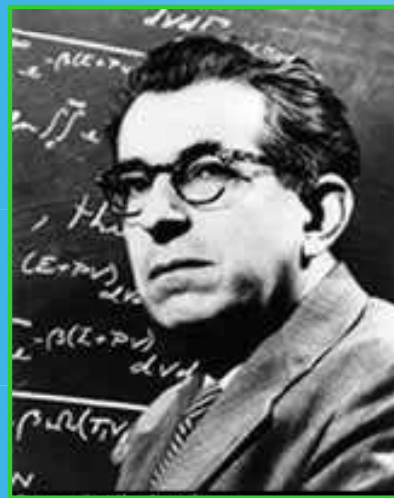


- **Dvě nepolární molekuly se navzájem elektricky „rozhodí“ (London)**

- vždy a všude, přitažlivé
- např. příčina koheze kapalin, tuhých látek
- London



Jack



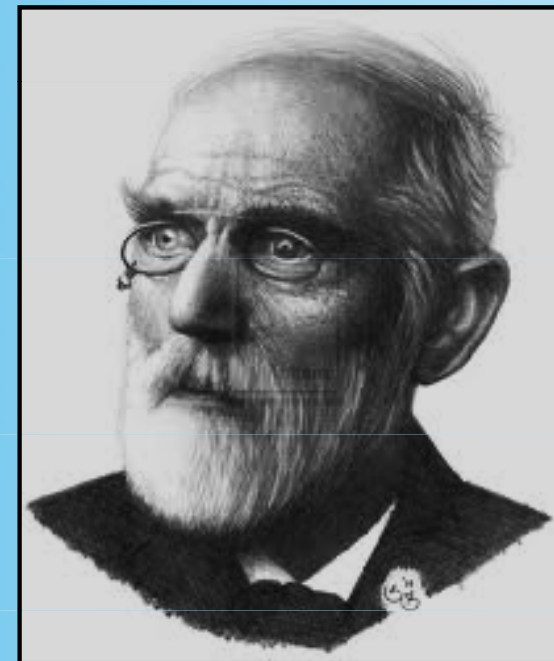
Fritz London
(1900-1954)

**kvantová
mechanika:
energie $\sim 1/r^6$**

Souhrnné označení pro:

- Debye + Keesom + London
- **přitažlivé síly**

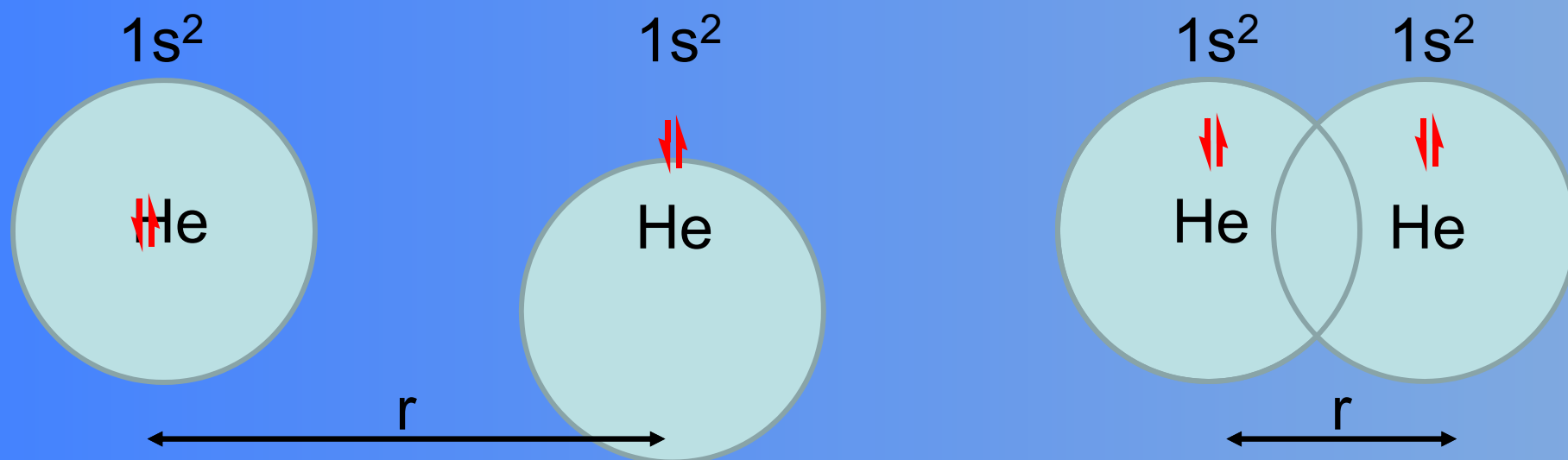
Johannes Diderik van der Waals
(1837-1923)
Nobel prize for physics 1910



MEZIMOLEKULÁRNÍ INTERAKCE

2. Interakce, při kterých se orbitály překrývají

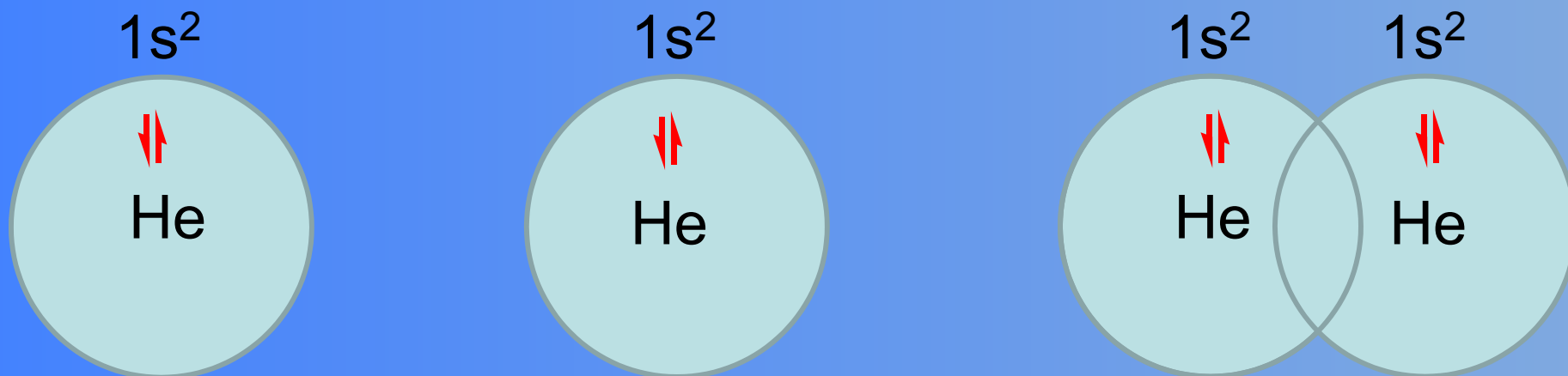
Pauliho repulze (překryvové repulze)



Pauliho repulze je způsobena repulzí vzájemně se překrývajících elektronových hustot a její podstatou je Pauliho princip výlučnosti dvou elektronů se stejným spinem ve stejném elektronovém obalu. **Pozor: podstatou této repulze není klasický elektrostatický efekt odpuzujících se elektronů!** Elektrony jedné molekuly sice odpuzují elektrony druhé molekuly, ale také přitahují její jádro, a výsledný efekt průniku elektronových obalů je stabilizace, tzv. «penetration energy», která je negativní!

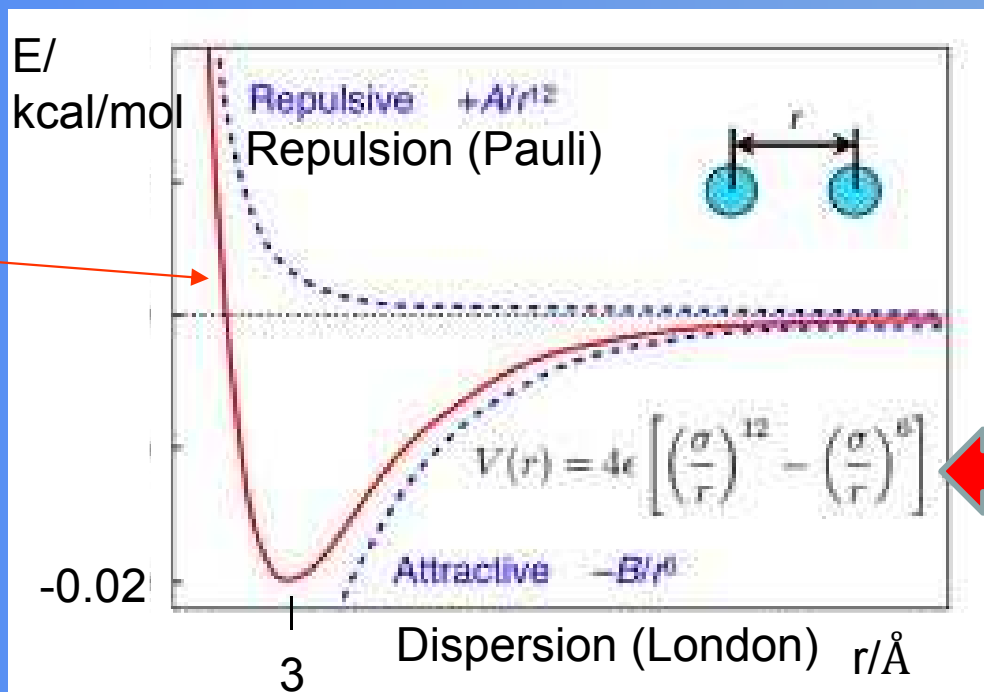
$$\text{energie} \sim 1/r^n \quad n = 9-12$$

Interakční energie dvou atomů He



Total interaction energy

Elektrostatickou stabilizaci v důsledku prolínání elektronových obalů (penetration energy, viz předchozí obrázek) zde zanedbáváme.



« Lennard-Jonesův potenciál »

MEZIMOLEKULÁRNÍ INTERAKCE

3. Vodíkové můstky

X-H...A

akceptor A má vždy volný elektronový pár
atom X donoru je většinou silně elektronegativní (N, O, F)

- proč je vodíkový můstek zvláštní interakce?
- důsledek struktury vodíkového atomu:

Má pouze 1 elektron, ten je navíc delokoalizován směrem k (většinou elektronegativnějšímu) atomu, na který je H-atom navázán. Pauliho repulze s atomem vodíku je tedy podstatně slabší než s jiným atomem.

- Má několik složek:
 - elektrostatickou, která u silných H-můstků převažuje
 - indukční (dipól X-H polarizuje A)
 - disperzní (všudypřítomná)
 - proti těmto složkám působí překryvová (Pauliho) repulze
 - kovalentní spojenou s přenosem náboje z volného el. páru akceptoru do antivazebného orbitálu donoru X-H

Cvičení 1

Replikace DNA: Popište úlohy následujících enzymů:

- DNA polymeráza III
- DNA polymeráza
- Helikáza
- DNA-ligáza
- Primáza
- Topoizomeráza

Cvičení 2. Lennard-Jonesův potenciál se běžně vyjadřuje třemi různými způsoby: 1. pomocí parametrů A, B; 2. pomocí parametrů σ , ϵ ; 3. pomocí parametrů ϵ , r_m (viz spodní graf).

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$$

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

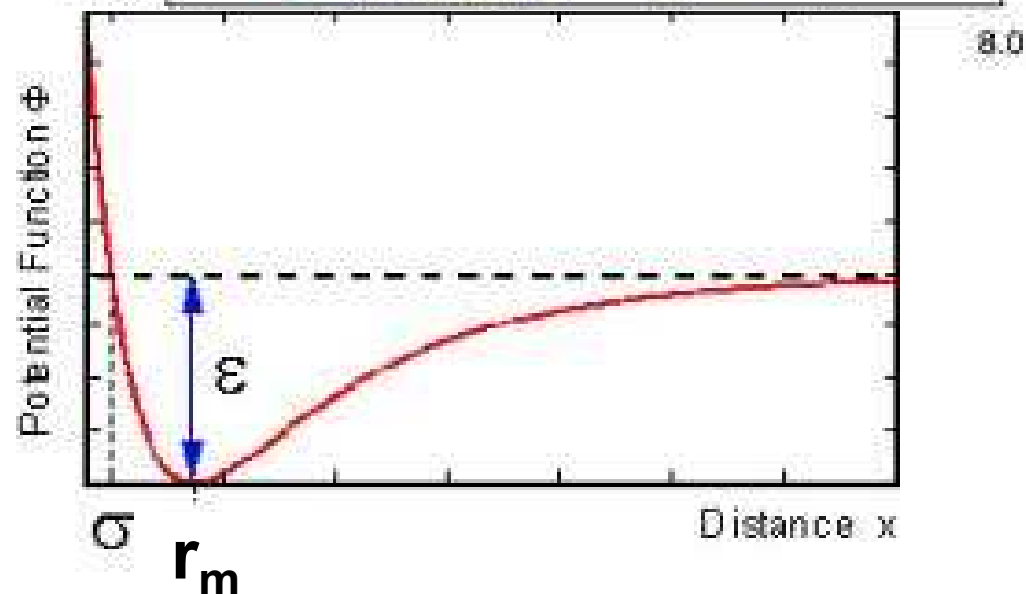
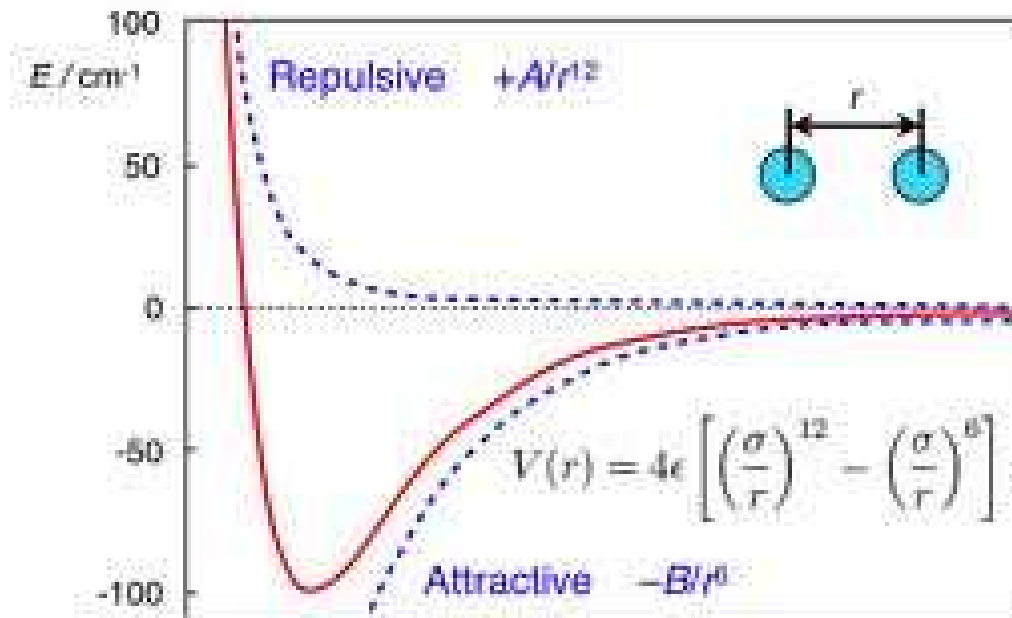
Cvičení 2a: vyjádřete ϵ a σ pomocí

parametrů A a B

Cvičení 2b: odvod'te

vzorec pro V(r) pomocí parametrů ϵ a r_m ;

vyjádřete A a B pomocí parametrů ϵ a r_m



$\sigma : r(V = 0) \quad r_m : r(V_{\min})$