

Biofizică

CURS 2

Elemente de fizica atomului și moleculei, structură, interacții și legături moleculare, aplicații
în biofizică

Elemente de fizica atomului și moleculei

numerele cuantice $\leftrightarrow$ stări de echilibru.

Pozițiile electronilor și energia atomului pot fi caracterizate de 5 parametri denumiți **numere cuantice**, cu ajutorul cărora orbitalii pot fi deosebiți între ei.

***n** - numărul cuantic principal (valori posibile: numere întregi, pozitive 1,2,3,... ∞); exprima din punct de vedere fizic pe ce pătura se găsește electronul respectiv (cat de departe de nucleu și ce energie are electronul)*

***l** - numărul cinetic orbital (valori posibile: numere întregi 0,1,2,... $n-1$, unde n este numărul cuantic principal; exprimă, din punct de vedere fizic, forma pe care o are orbitalul și descrie, practic, distribuția spațială de sarcina negativă din jurul nucleului;*

***m_l** - numărul cuantic magnetic (valori posibile: numere întregi $-l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, +l$; exprimă modul în care electronii interacționează cu câmpuri magnetice externe;*

***s** - numărul cuantic de spin (valori posibile în cazul electronilor: $+ 1/2$)*

***m_s** – numărul cuantic magnetic de spin (are două valori posibile: $\pm 1/2$);*

Elemente de fizica atomului și moleculei

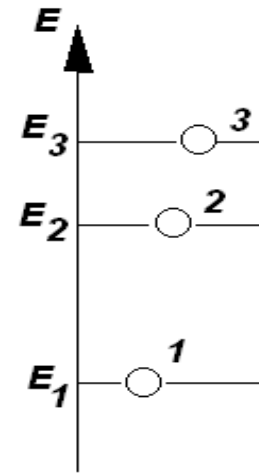
Principiile formării materiei

1. *Principiul lui Pauli:* într-un atom nu pot exista 2 sau mai multi e^- cu toate numerele cuantice identice

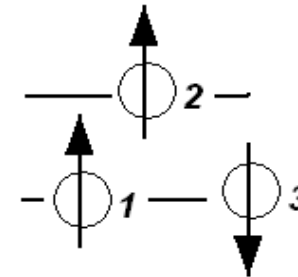
Elemente de fizica atomului și moleculei

2. Principiul energetic: orbitalii* sunt ocupați în ordinea creșterii energiei ($1s < 2p < 3d$)

**orbital = nor electronic (probabilitatea de existență a electronului în învelișul electronic)*



3. principiul lui Hund: orbitalii sunt ocupați mai întâi de electronii cu spin paralel ($+1/2$) și apoi de cei cu spin antiparalel ($-1/2$)



Elemente de fizica atomului și moleculei

MOLECULE

Se formează prin stabilirea de legături între doi sau mai mulți atomi:

- biatomice
 - același element (H_2 , O_2)
 - elemente diferite (NaCl)
- poliatomice
 - același element (C_4 , P_5)
 - elemente diferite (H_2O)
 - monomeri: nucleotide (ATP)
aminoacizi (alanina)

Elemente de fizica atomului și moleculei

MACROMOLECULE biologice

- Acizi nucleici: macromolecule informaționale formate din nucleotide
- Proteine: macromolecule funcționale formate din lanțuri de aminoacizi
- Lipide: macromolecule structurale formate dintr-un cap hidrofil și o coadă hidrofobă
- Glucide: macromolecule energetice formate din compusi hidroxicarbonilici

Elemente de fizica atomului și moleculei

Bioelemente

21 elemente esențiale împărțite în trei grupe:

-*grupa I* - elemente abundente (60%):

C, H, O, N

-*grupa II* - elemente puțin abundente (39%):

P, S, Na, K, Ca, Mg, Cl

-*grupa III* - elemente rare (1%):

Fe, Ni, Cu, Zn, Co, Si, Mn, B, I, Va

Elemente de fizica atomului și moleculei

Legături moleculare

- *legături covalente;*
- *legături ionice;*
- *legături (punți) de hidrogen;*
- *legături van der Waals;*
- *legătura metalică*
- *legături metalo-organice*
- *legături hidrofobe*

Elemente de fizica atomului și moleculei

Legătura ionică

- **de mare distanță** (orbitalii atomici nu se întrepătrund)
- **nu este dirijată spațial** (forța electrică are simetrie sferică)
- **nu se saturează** (un ion nu interacționează numai cu un alt ion)
- **puternică*** ($E_{leg} > \text{sute } kJ/mol$)

*Tăria unei legături se obține prin comparația cu energia mișcării termice kT

$$kT = 4.28 \cdot 10^{-21} J / molecula = 2.58 kJ / mol$$

Elemente de fizica atomului și moleculei

Legătura covalentă

- **de mică distanță** (orbitalii atomici se întrepătrund pentru a forma orbitali moleculari)
- **dirijată spațial** (se pot forma molecule cu configurații diferite)
- **se saturează** (se pot pune în comun numai un număr limitat de electroni)
- **puternică** ($E_{leg} > \text{sute } kJ/mol$)

Elemente de fizica atomului și moleculei

Legatura metalică

Se formează prin punerea în comun a electronilor de valență de către atomii rețelei cristaline

- atomii se afla in poziții fixe (nodurile rețelei)
- electronii comuni se deplasează liber printre nodurile rețelei (nor electronic)
- puternică

Elemente de fizica atomului și moleculei

Legatura metalo-organică

Combinație de legături ionice și covalente

Se manifesta ca o forță de atracție între ionul metalic și anumite părți ale moleculei ce îl înconjoară (cu afinitate pentru acel ion)

Depind de :

- afinitatea elementelor implicate
- structura moleculei
- reacțiile în care este implicată molecula
- concentrație

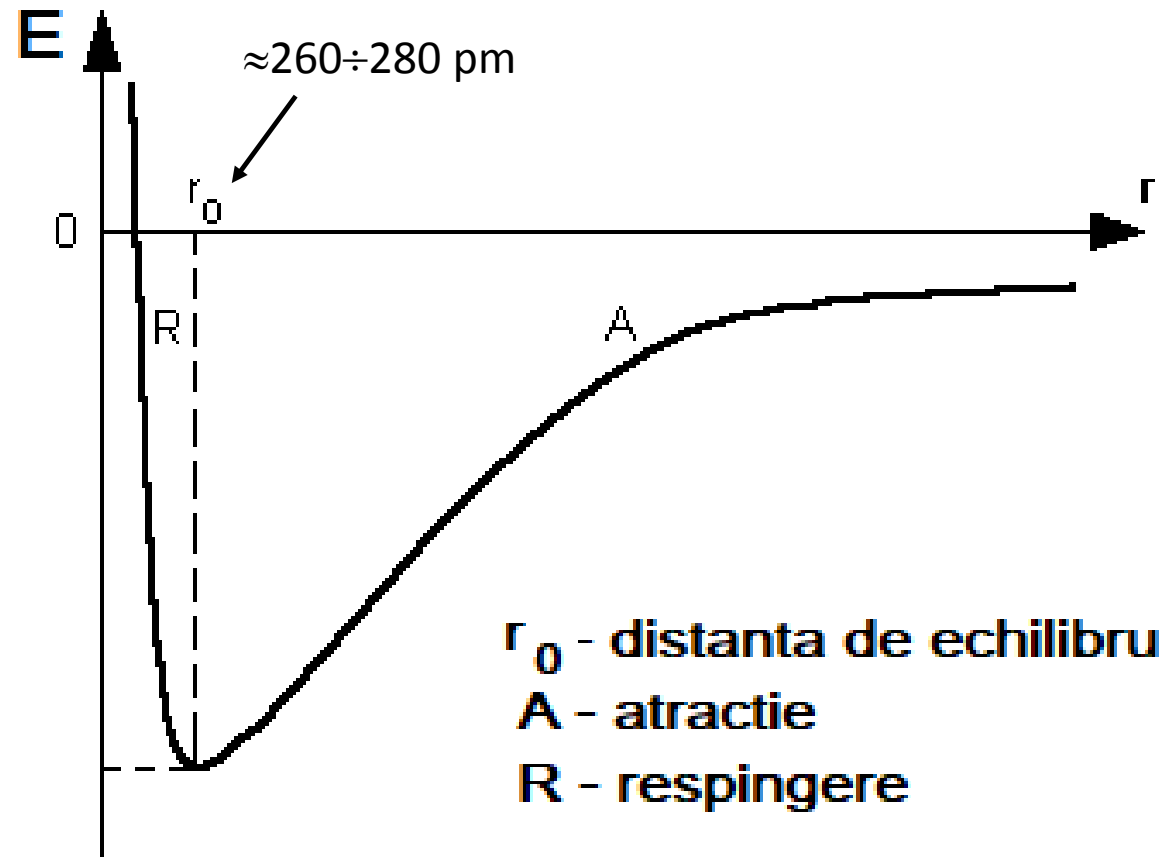
Elemente de fizica atomului și moleculei

van der Waals

- *legăturile van der Waals* se datorează interacției momentului dipolar al unei molecule cu momentul dipolar al alteia.
- chiar și între moleculele care nu au un moment dipolar permanent pot apărea forțe de tip van der Waals ce au ca sursă momentele dipolare instantanee ale moleculei respective.
- legăturile van der Waals sunt legături de atracție la distanță medie și de respingere la distanță foarte mică.
- nu sunt legături *directionale* și *saturabile*.

Elemente de fizica atomului și moleculei

van der Waals



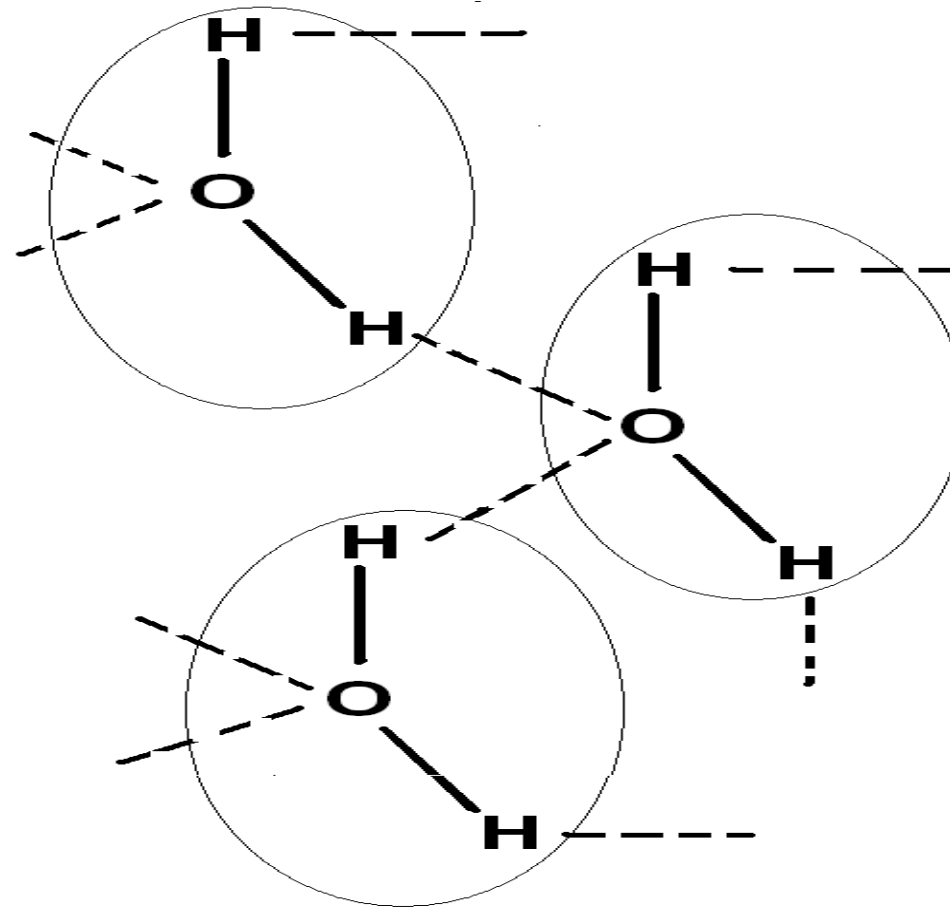
Elemente de fizica atomului și moleculei

legăturile (punțile) de hidrogen

- *legăturile (punțile) de hidrogen* se formează între un atom de hidrogen, care este deja implicat într-o legătura covalentă și un alt atom ce are caracter electronegativ, atom ce face parte, la rândul lui, dintr-o legătură covalentă.
- caracter ionic/covalent
- este o legătură slabă.
- este o legătură *saturabilă* și *directională*.

Elemente de fizica atomului și moleculei

legăturile (punțile) de hidrogen



— Legătură covalentă

- - - Legătură de hidrogen

Elemente de fizica atomului și moleculei

Legătura (interacția) hidrofobă

Generată de entropie

