

Solu- ja molekyylibiologian perusteet

Jaksollinen järjestelmä: Atomit

Miksi kemiaa pitää oppia tällä kurssilla?

Biologiset organismit toimivat fysiikan lakien mukaan ja koostuvat kemiallisista yhdisteistä

- Proteiineilla on rakenteita, jotka selittävät niiden toimintaa
- Lääkeaineiden teho perustuu niiden vaikuttavuudesta biokemiallisiin prosesseihin
- Ympäristön aiheuttama kemiallinen kuormitus voivat vaikuttaa elinmahdollisuuksiin
- Lähes kaikki tekemämme mittaukset perustuvat kemiallisiin määrittäyksiin

Biologiset organismit eivät ole muuta kuin fysiikan lakien mukaan toimivia kokonaisuuksia

- Kun ymmärrämme solujen ja molekyylien toiminnan, ymmärrämme myös laajempia kokonaisuuksia

Looginen ja mekanistinen tarkastelu on hauskaa

- Solu- ja molekyyli-tason tarkastelut ovat hyvää aivojumppaa!
- Opimme erilaisia vuorovaikutusreittejä ilman mystisiä selityksiä

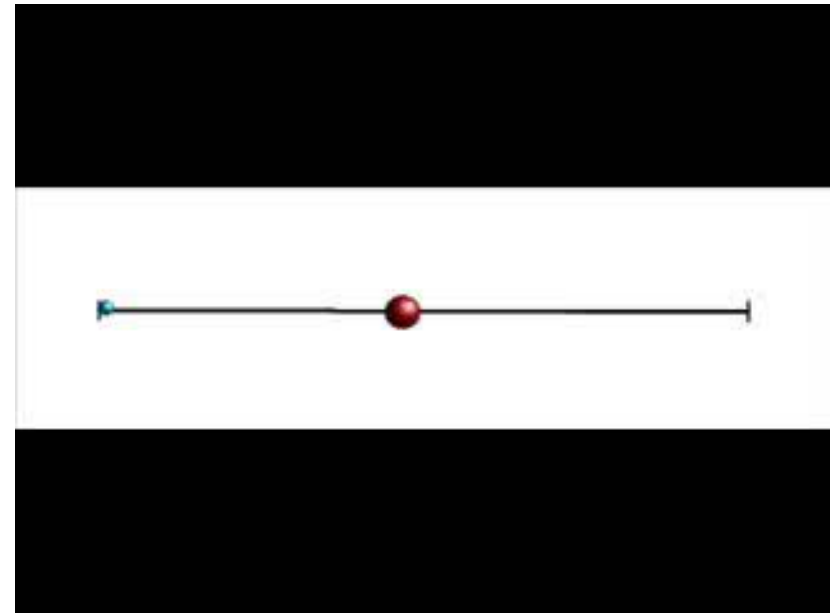
Coulombin laki kuvaa voimaa, jolla esim. elektronit pysyvät ytimien lähellä

Vastakkaisesti varautuneet partikkelit vetävät toisiaan puoleensa ja saman merkkiset hylkivät toisiaan.

Siten elektronit kulkevat sähköjohdossa – navalta + navalle.

- Vastaavasti negatiivisesti varautuneet elektronit saavat vauhtia positiivisesti varautuneesta atomin ytimestä.
- Elektronien vauhti kiihtyy ydintä kohti mentäessä, mutta vauhti on niin kova, että elektroni sinkoutuu ytimen toiselle puolelle

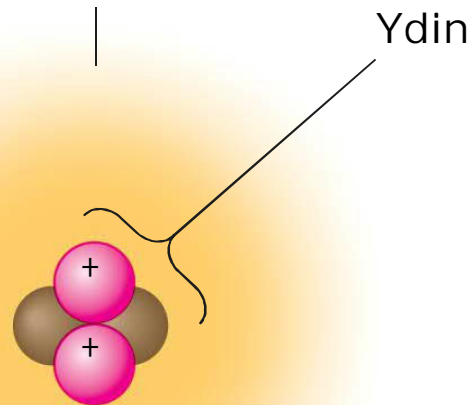
Atomin ydin sisältää varauksettomia neutroneja ja positiivisesti varautuneita protoneja.



$$F = \frac{1}{4\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{r^2}$$

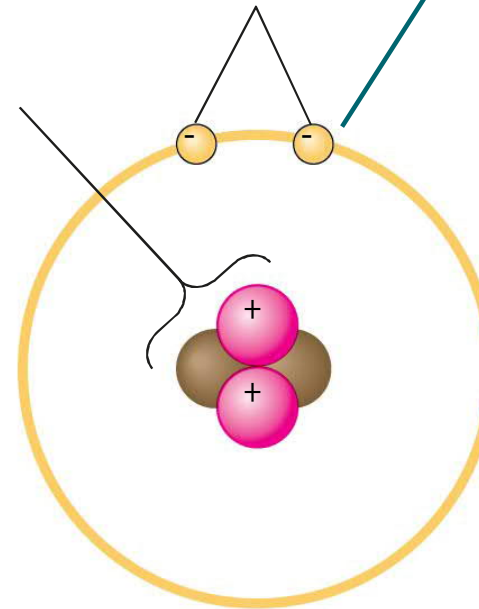
Atomin rakenne

Heliumytimen ympärillä on kahden elektronin kulkema pilvi (orbitaali)



(a)

Elektronit

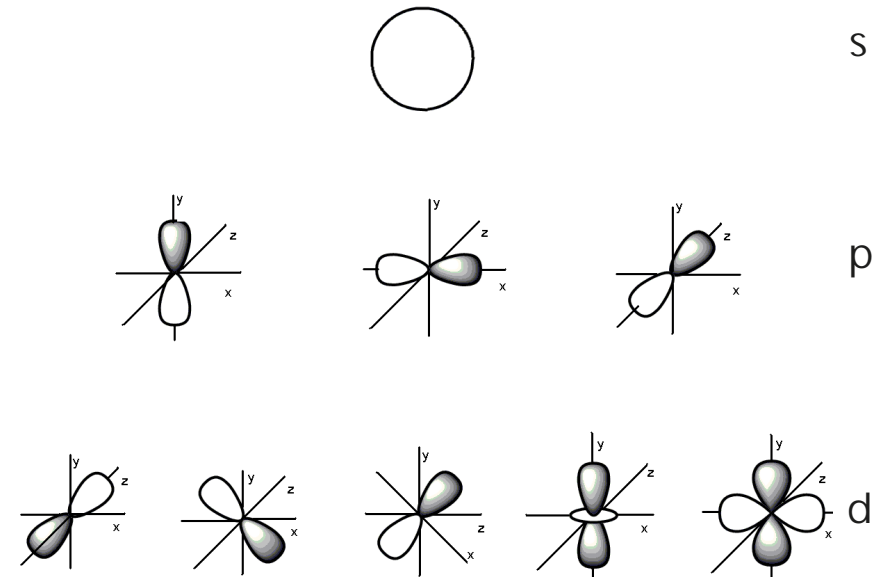


(b)

Kun elektronien lukumäärä kasvaa, osa elektroneista päättyy pallomaisten orbitaalien sijaan keilamaiset orbitaaleille.

Yhdelle orbitaalille mahtuu ainoastaan kaksi eri suuntiin pyörivää elektronia.

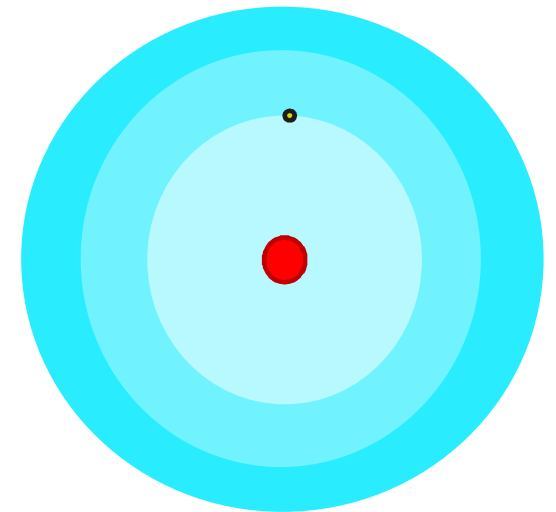
- Elektronien lukumäärän kasvaessa, on uloimmaisten elektronien oltava kauempana atomin ytimestä
- Elektronien siirto pois ytimen läheltä vaatii energiaa
- Kun osa elektroneista kulkee keilamaisilla orbitaaleilla, ne mahtuvat lähemmäs ydintä (ovat alemmassa energiatilassa)
- Keilamaiset orbitaalit kulkevat erisuuntiin, jotta elektronit ovat kaukana toisistaan
- Orbitaaleja kutsutaan kirjaimilla s, p, d ja f



Orbitaalit, elektronikuoret ja elektronit

Kaikilla alkuaineilla uskotaan olevan samanlaiset elektroniorbitaalit

- Orbitaalien määrä riippuu siitä, kuinka kaukana ollaan atomin ytimeä.
- Lähellä ydintä voi olla vain rajallinen määrä elektroneja, jolloin vedyn/heliumin elektronit ovat ensimmäisen elektronikuoren s-orbitaaleilla
- Seuraavalle elektronikuorelle mahtuu enemmän orbitaaleja, jolloin esim. hiilellä orbitaaleja on uloimmalla kuorella neljä.
- Orbitaalit voivat olla joko miehitettyjä tai miehittämättömiä sen mukaan, onko niillä elektroneja
- Elektronit täytetään orbitaaleille ja elektronikuorille järjestyksessä keskeltä alkaen (alimmasta energiatasosta)



Vetyatomi.
Ulommat orbitaalit miehittämättömiä

Alkuaineet ja jaksollinen järjestelmä

1 H	maa-alkaali-metallit										puoli-metallit		epämetallit			halo-geenit	jalo-kaasut	2 He	
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
11 Na	12 Mg	siirtymämetallit										metallit		13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr		
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe		
55 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn		
87 Fr	88 Ra	89-103	104 Rf	105 Dd	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo		

alkaali-metallit

lantanidit

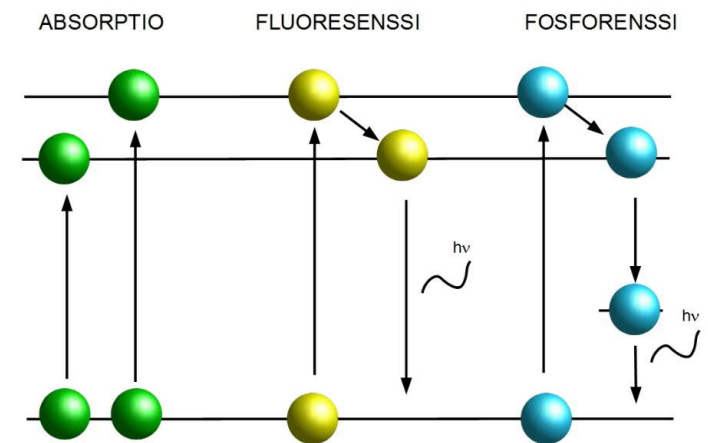
aktiniidit

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nb	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

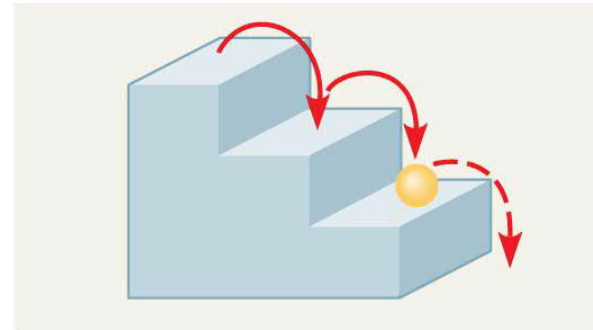
Elektronien viritys

Orbitaalien miehittäminen elektroneilla on selkeää – erittäin kylmässä.

- Elektronit voivat kuitenkin imeä itseensä energiaa, jolloin ne voivat nousta hetkellisesti toiselle orbitaalille.
- Tämä aiheuttaa aineiden värin (aine imee valoenergiaa)
- Palautuessaan alempienergiselle orbitaalille elektroni vapauttaa energiaa joko lämpönä tai valona.
- Tähän perustuvat nopeasti energian menettävät fluoresoivat ja pitkään valaisevat fosforoivat aineet.



Elektronien energiatiloja
Voidaan verrata palloon, joka
vierii alas portaita.

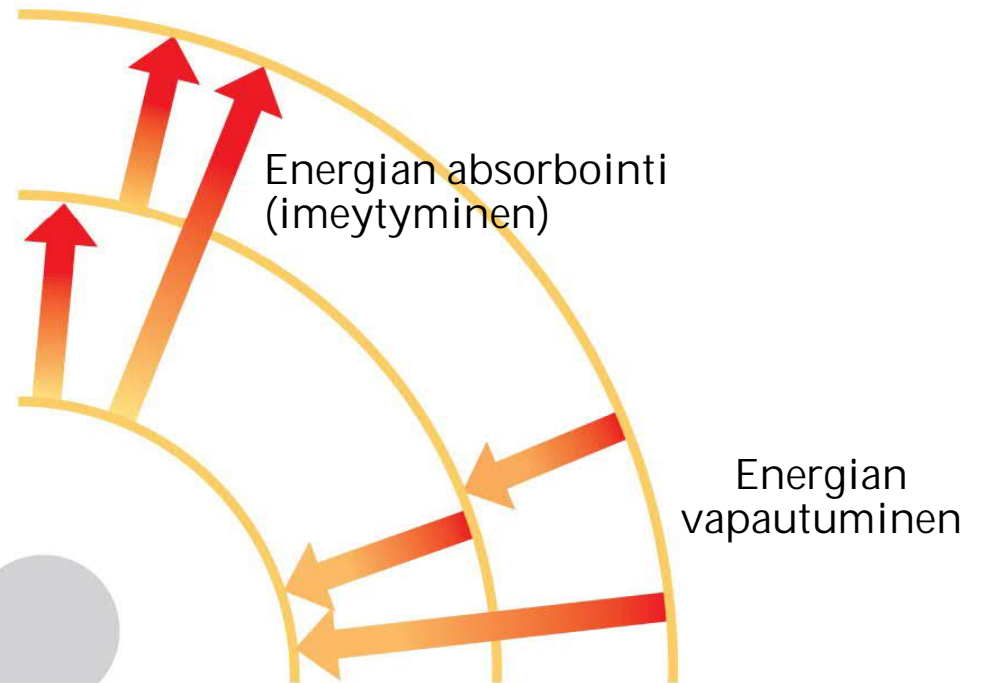


3. elektronikuori

2. elektronikuori

1. elektronikuori
(alhaisin energiataso)

Atomin
ydin



GFP on esimerkki fluoresoivasta proteiinista

Vihreä fluoresoiva proteiini (GFP) on tynnyrinmallinen

- Imee (eksitoi) energiaa 395 nm aallonpituudella
- Vapauttaa energiaa (emittoi) 509 nm aallonpituudella
- Korkeampi aallonpituus tarkoittaa alhaisempaa energiaa eli osa elektronin saamasta energiasta on vapautunut lämpönä.
- GFP on yleisin työkalu solussa tapahtuvan aineiden liikkumisen selvittämisessä.
- Fluoresoivia proteiineja löytyy myös muitakin värejä.



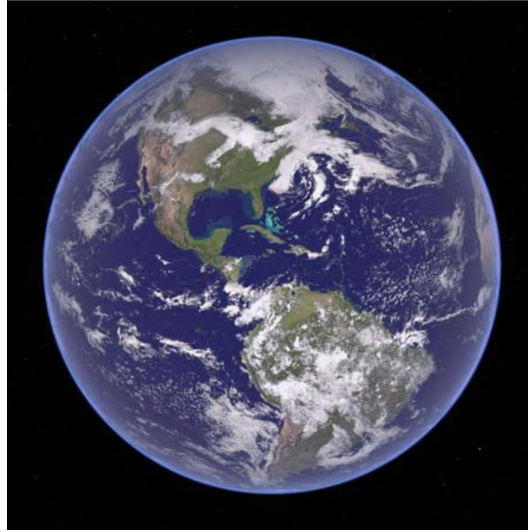
Kiitos!



UNIVERSITY OF
EASTERN FINLAND

uef.fi

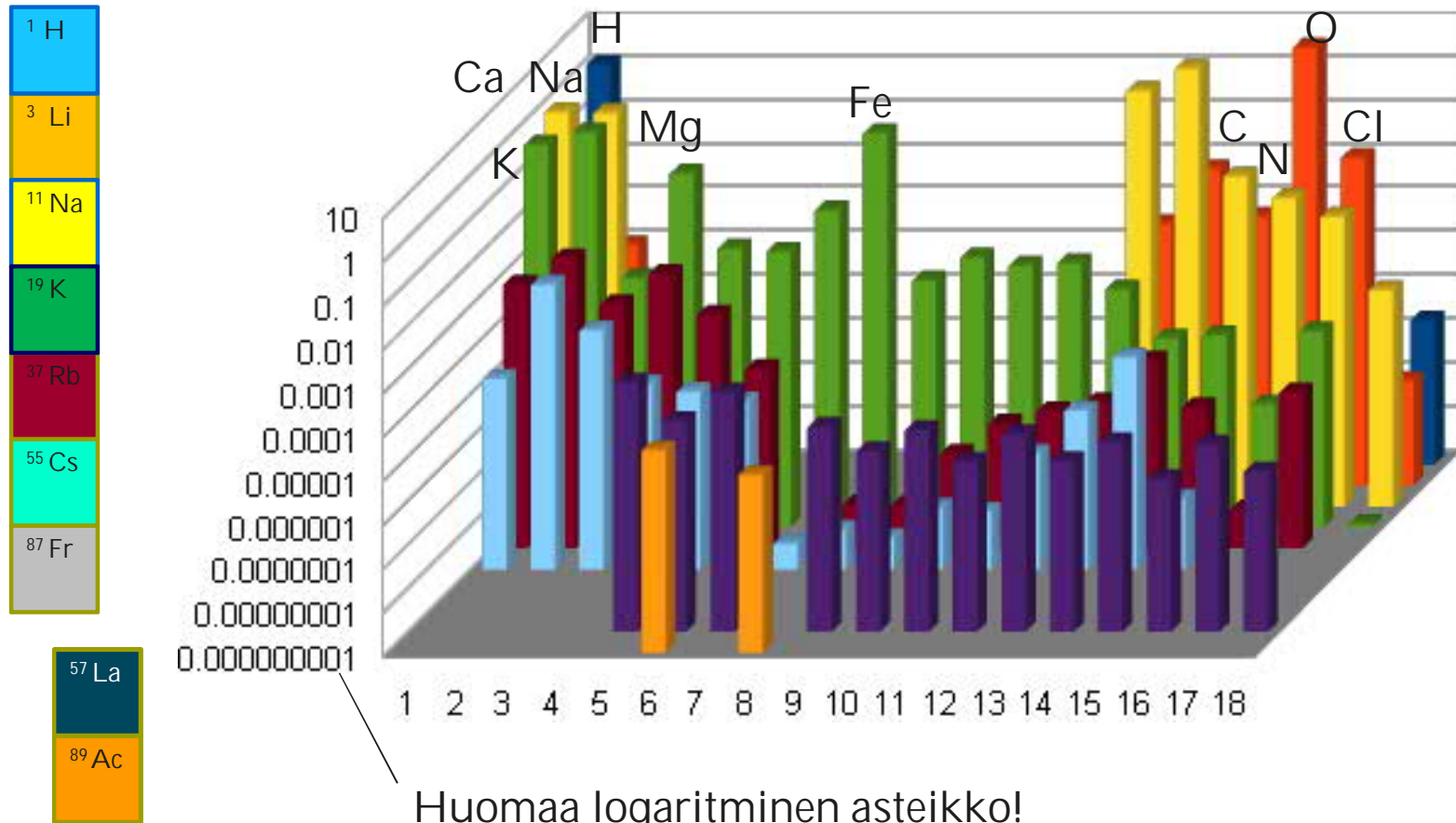




Solu- ja molekyylibiologian perusteet

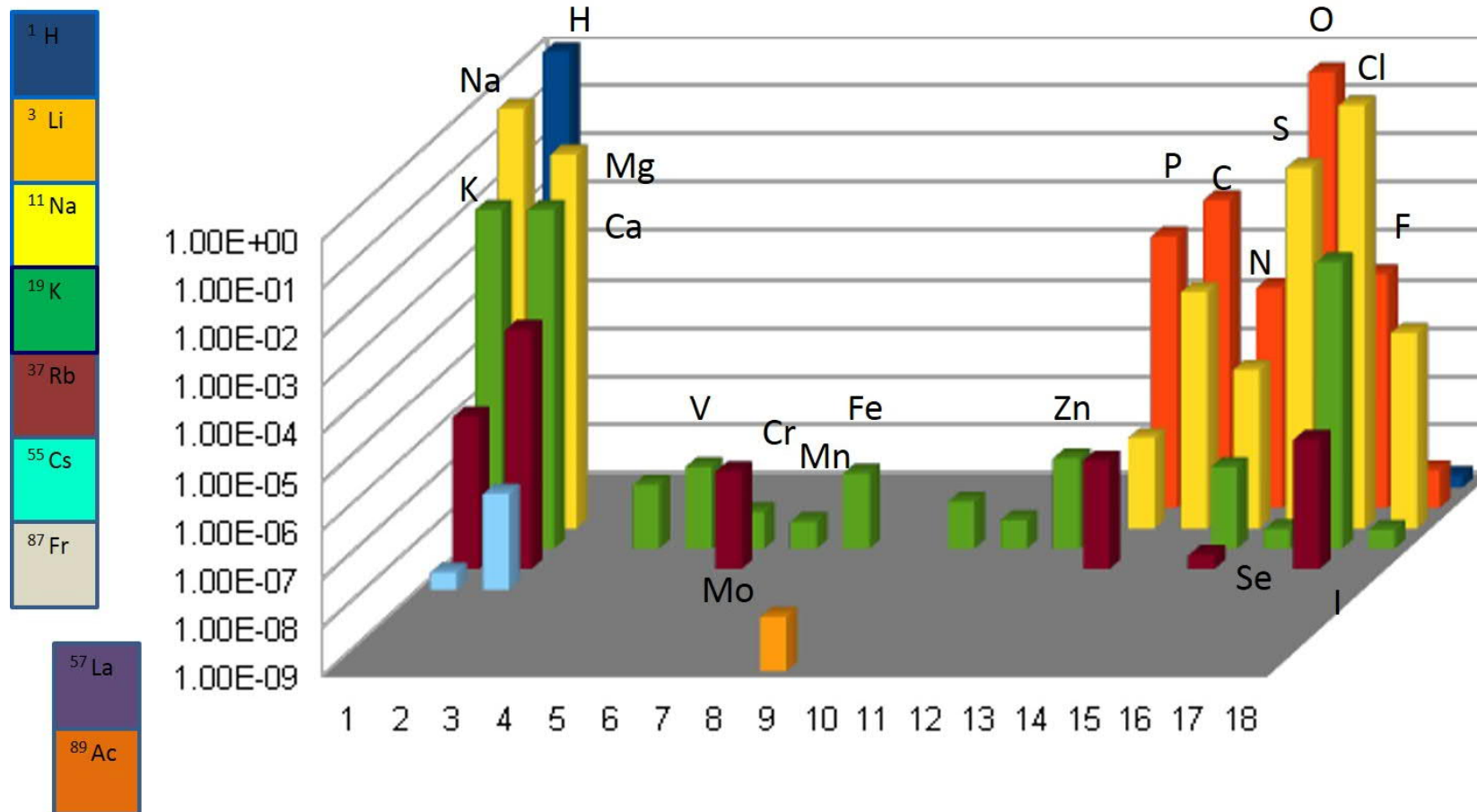
Jaksollinen järjestelmä: Biologiset atomit

Mitä atomeja maapallolta löytyy?

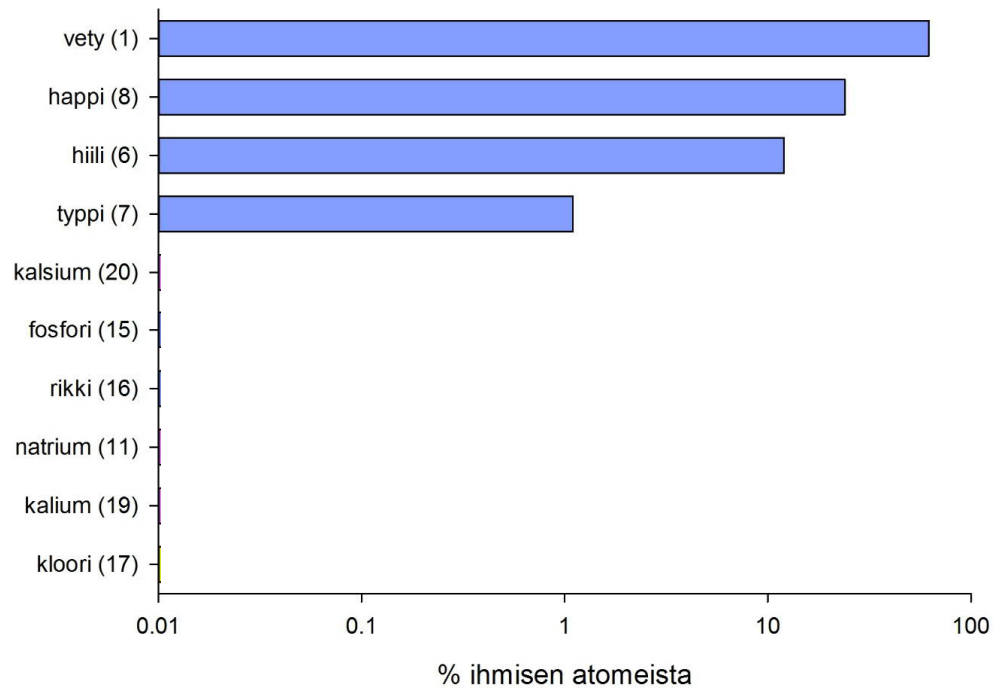


Huomaa logaritminen asteikko!
Harvinaisimpia aineita miljardisosa yleisimpiin verrattuna

Alkuaineiden yleisyys merivedessä



Alkuaineiden yleisyys ihmisen kehossa



Elimistöstä löytyy myös pieniä määriä:

booria, (B)	mangaania (Mn)
kromia (Cr)	molybdeenia (Mo)
kobolttia (Co)	seleenä (Se)
kuparia (Cu)	piitä (Si)
fluoria (F)	tinaa (Sn)
jodia (I)	sinkkiä (Zn)
rautaa (Fe)	

Elämän alkuaineet

		Ionitasapaino ja sähkönjohtavuus										Hapetus ja pelkistys									
		Rakenteet				Happo-emäs katalyytti						Energian varastointi				Esimät biologiset alkuaineet					
1 H																			2 He		
3 Li	4 Be	Solusignaalit				Elektroninsiirto						5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne				
11 Na	12 Mg	pH-puskuri		Molekyylisen muokkauksen						Välttämättömiä useimmille eliöille						13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr				
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe				
55 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn				
87 Fr	88 Ra	89-103	104 Rf	105 Dd	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo				

Välttämättömiä joillekin eliöille

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nb	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Biologisesti merkittävät alkuaineet

Kaikkia jaksollisen järjestelmän alkuaineita ei tarvitse hallita biotieteissä.

- Suurin osa biologisesti vaikuttavista molekyyleistä on rakennettu muutamasta alkuaineesta (vety, happi, hiili, typpi).
- Peruseriaatteena hiiliketjusta valmistettu runko, johon saadaan reaktiivisuutta toiminnallisilla ryhmillä (functional groups)
- Metallit ovat biologiassa harvinaisia, mutta välttämättömiä kemialliseen muokkaukseen
- Metallien merkitystä tutkimus on oma tieteenalansa (biologinen epäorgaaninen kemia)

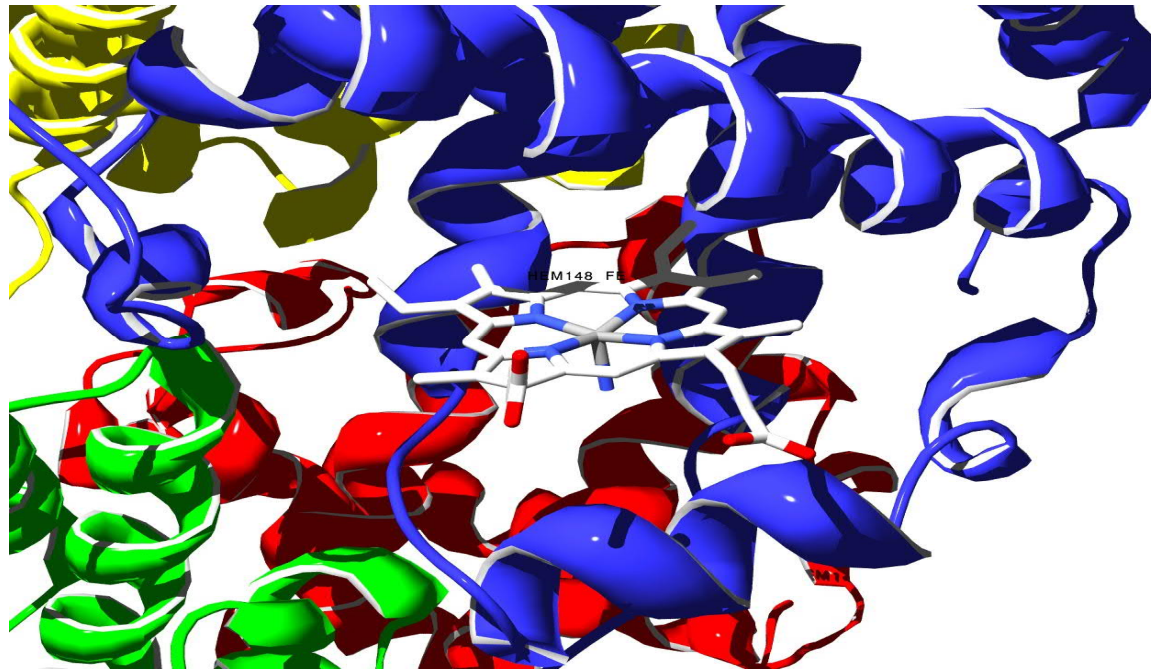
Kiitos!



UNIVERSITY OF
EASTERN FINLAND

uef.fi





Solu- ja molekyylibiologian perusteet

Jaksollinen järjestelmä: Massa ja isotoopit

Atomimassa

Atomeilla on massa eli ne painavat

- Atomin ydin koostuu neutroneista ja protoneista ja atomiytimen ympärillä elektronipilvi.
- Varautumattomilla atomeilla elektronien ja protonien määrä on sama.
- Atomin massa voidaan laskea, mikäli sen komponentit tunnetaan

$$m = n_N m_N + n_P m_P + n_E m_E = n_N m_N + n_{P,E} (m_p + m_e)$$
$$m = n_N * 1.675 * 10^{-27} \text{ kg} + n_{P,E} (1.673 * 10^{-27} + 9.1 * 10^{-31}) \text{ kg}$$

Neutronin massa (red circle around $1.675 * 10^{-27} \text{ kg}$)

Protonin massa (blue circle around $1.673 * 10^{-27}$)

Elektronin massa (green circle around $9.1 * 10^{-31}$)

Neutronin ja protonin massa ovat lähes saman suuruisia ja 1000-kertaa enemmän kuin elektronin massa!

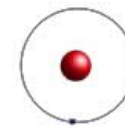
Atomimassa ja isotoopit

Atomien massa aiheutuu ytimessä olevien protoneiden ja neutroneiden lukumäärästä.

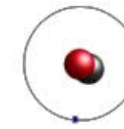
- Alkuaineella neutronien määrä vaihtelee, jolloin alkuainetta esiintyy eri isotooppeina.
- Protonien ja neutronien yhteismäärä (A) ilmaistaan yläindeksillä, jolloin järjestysluku (Z) on alaindeksinä.



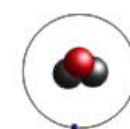
- Taulukoiden atomimassa on laskettu summaamalla eri isotooppien massa (m_A) kerrottuna ko. isotoopin yleisyydellä (P_A)



${}^1\text{H}$
 $m = 1 \text{ u}$



${}^2\text{H}$
 $m = 2 \text{ u}$



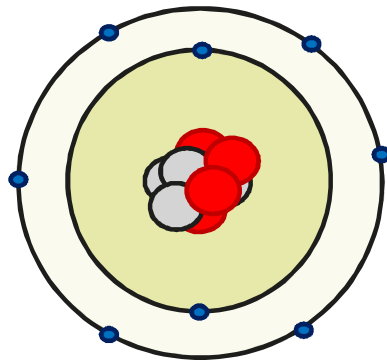
${}^3\text{H}$
 $m = 3 \text{ u}$

$$m = \sum_{A=Z}^{Z+x} P_A m_A$$

$$m_H = 99.985 * 1.007825 + 0.015 * 2.0141018$$

$$m_H = 1.0079 \text{ u}$$

Atomimassa ja atomipaino



O

8 protonia
8 neutronia
8 elektronia

Hapen massa voidaan ilmoittaa joko atomimassayksikköinä (u tai Da), joka on 1/12 hiilen (^{12}C) massasta. Sen arvo on hyvin lähellä massalukua (protonien ja neutronien yhteismassaa).

Mikäli atomista esiintyy erilaisia isotooppeja, ilmoitetaan massa usein niiden painotettuna keskiarvona (suhteutettuna atomipainona)

$$m = \sum P_A m_A$$

Alkuaineet ja jaksollinen järjestelmä

¹ H 1,01	maa-alkaali- metallit																² He 4,00	
³ Li 6,94	⁴ Be 9,01											puoli- metallit	⁵ B 10,81	⁶ C 12,01	⁷ N 14,01	⁸ O 16,00	⁹ F 19,00	¹⁰ Ne 20,18
¹¹ Na 22,99	¹² Mg 24,31	siirtymämetallit										¹³ Al 26,98	¹⁴ Si 28,09	¹⁵ P 30,97	¹⁶ S 32,07	¹⁷ Cl 35,45	¹⁸ Ar 39,95	
¹⁹ K 39,10	²⁰ Ca 40,08	²¹ Sc 44,96	²² Ti 47,88	²³ V 50,94	²⁴ Cr 52,00	²⁵ Mn 54,94	²⁶ Fe 55,85	²⁷ Co 58,93	²⁸ Ni 48,69	²⁹ Cu 64,55	³⁰ Zn 65,39	³¹ Ga 69,73	³² Ge 72,64	³³ As 74,92	³⁴ Se 78,96	³⁵ Br 79,90	³⁶ Kr 89,80	
³⁷ Rb 85,47	³⁸ Sr 87,62	³⁹ Y 88,91	⁴⁰ Zr 91,22	⁴¹ Nb 92,91	⁴² Mo 95,94	⁴³ Tc 98,9	⁴⁴ Ru 101,1	⁴⁵ Rh 102,9	⁴⁶ Pd 106,4	⁴⁷ Ag 107,9	⁴⁸ Cd 112,4	⁴⁹ In 114,8	⁵⁰ Sn 118,7	⁵¹ Sb 121,8	⁵² Te 127,6	⁵³ I 126,9	⁵⁴ Xe 131,3	
⁵⁵ Cs 132,9	⁵⁶ Ba 137,3	⁵⁷⁻⁷¹	⁷² Hf 178,5	⁷³ Ta 180,5	⁷⁴ W 183,9	⁷⁵ Re 186,2	⁷⁶ Os 190,2	⁷⁷ Ir 192,2	⁷⁸ Pt 195,1	⁷⁹ Au 197,0	⁸⁰ Hg 200,1	⁸¹ Tl 204,4	⁸² Pb 207,2	⁸³ Bi 209,0	⁸⁴ Po 209,0	⁸⁵ At 210,0	⁸⁶ Rn 222,0	
⁸⁷ Fr 223,0	⁸⁸ Ra 226,0	⁸⁹⁻¹⁰³	¹⁰⁴ Rf 261	¹⁰⁵ Dd 262	¹⁰⁶ Sg 266	¹⁰⁷ Bh 264	¹⁰⁸ Hs 269	¹⁰⁹ Mt 268	¹¹⁰ Ds 269	¹¹¹ Rg 272	¹¹² Cn 277	¹¹³ Uut 289	¹¹⁴ Uuq 289	¹¹⁵ Uup	¹¹⁶ Uuh	¹¹⁷ Uus	¹¹⁸ Uuo	
alkaali- metallit												metallit				halo- jalo- geenit kaasut		
lantanidit		⁵⁷ La 139,0	⁵⁸ Ce 140,1	⁵⁹ Pr 140,9	⁶⁰ Nb 144,2	⁶¹ Pm 144,9	⁶² Sm 150,4	⁶³ Eu 152,0	⁶⁴ Gd 157,2	⁶⁵ Tb 158,9	⁶⁶ Dy 162,5	⁶⁷ Ho 164,9	⁶⁸ Er 176,3	⁶⁹ Tm 168,9	⁷⁰ Yb 173,0	⁷¹ Lu 175,0		
aktiniidit		⁸⁹ Ac 227,0	⁹⁰ Th 232,0	⁹¹ Pa 231,0	⁹² U 238,0	⁹³ Np 237,0	⁹⁴ Pu 244,0	⁹⁵ Am 243,1	⁹⁶ Cm 247,1	⁹⁷ Bk 247,1	⁹⁸ Cf 251,1	⁹⁹ Es 254	¹⁰⁰ Fm 257,1	¹⁰¹ Md 258,1	¹⁰² No 259,1	¹⁰³ Lr 262		

Atomimassa ja molekyyli­massa

Järjestysluku (Z)

Atomimassa (u)

¹ H 1,01							² He 4,00
³ Li 6,94	⁴ Be 9,01	⁵ B 10,81	⁶ C 12,01	⁷ N 14,01	⁸ O 16,00	⁹ F 19,00	¹⁰ Ne 20,18
¹¹ Na 22,99	¹² Mg 24,31	¹³ Al 26,98	¹⁴ Si 28,09	¹⁵ P 30,97	¹⁶ S 32,07	¹⁷ Cl 35,45	¹⁸ Ar 39,95
¹⁹ K 39,10	²⁰ Ca 40,08	³¹ Ga 69,73	³² Ge 72,64	³³ As 74,92	³⁴ Se 78,96	³⁵ Br 79,90	³⁶ Kr 89,80
³⁷ Rb 85,47	³⁸ Sr 87,62	⁴⁹ In 114,8	⁵⁰ Sn 118,7	⁵¹ Sb 121,8	⁵² Te 127,6	⁵³ I 126,9	⁵⁴ Xe 131,3
⁵⁵ Cs 132,9	⁵⁶ Ba 137,3	⁸¹ Tl 204,4	⁸² Pb 207,2	⁸³ Bi 209,0	⁸⁴ Po 209,0	⁸⁵ At 210,0	⁸⁶ Rn 222,0
⁸⁷ Fr 223,0	⁸⁸ Ra 226,0	¹¹³ Uut	¹¹⁴ Uuq 289	¹¹⁵ Uup	¹¹⁶ Uuh	¹¹⁷ Uus	¹¹⁸ Uuo

Esim. vesimolekyyli (H₂O) sisältää 2 vetyatomia ja yhden happiatomin.

Vesimolekyylin massa on siten
 $2 \cdot 1,01 + 16,00 = 18,02 \text{ u}$

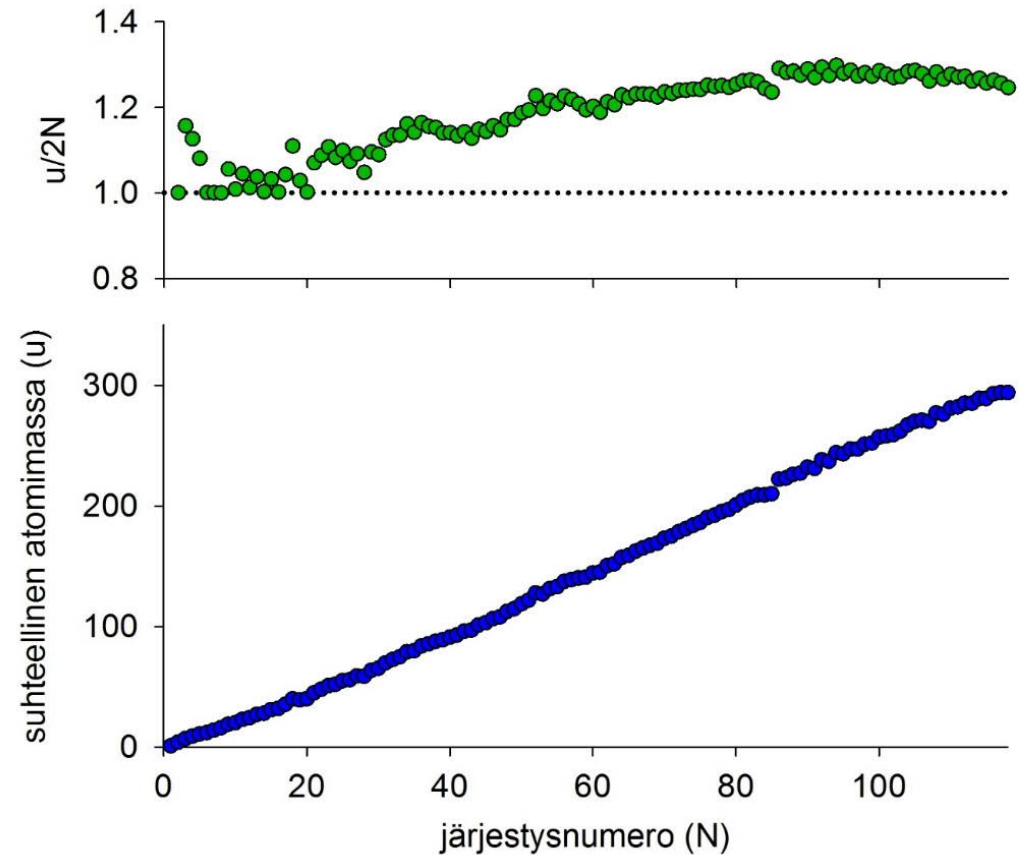
grammoina massa olisi

$$18,02 \text{ u} = \frac{1,66 \cdot 10^{-24} \text{ g}}{\text{u}} = 3 \cdot 10^{-23} \text{ g}$$

Alkuaineiden massa

Alkuaineiden massa vaihtelee järjestysnumeron mukaan.

- Atomimassa kasvaa tasaisesti järjestysnumeron kasvaessa (uraani on raskaampaa kuin vety).
- Summittaisen arvion atomin massasta saa kertomalla järjestysnumero N kahdella.
- Raskaammilla alku-aineilla massa on jopa 20% arvioitua enemmän.



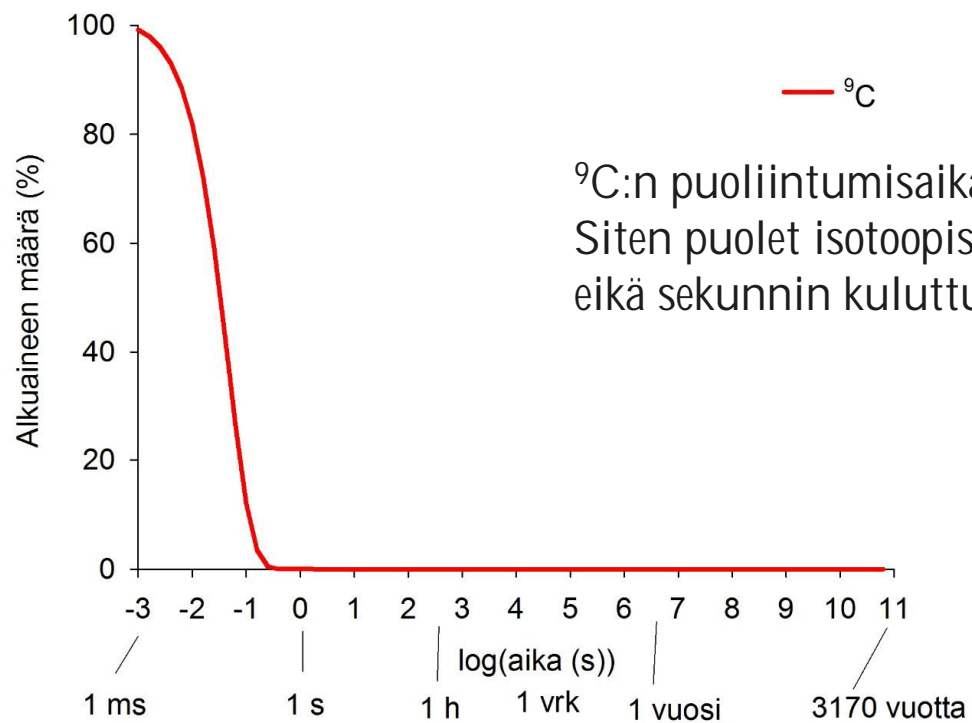
Isotoopit ja radioaktiivisuus

Protonien ja neutronien määrä (A)	massa	puoliintumisaika $t_{1/2}$
^8C (6+2)		
^9C (6+3)		127 ms
^{10}C (6+4)		19 s
^{11}C (6+5)	11.01	20 min
^{12}C (6+6)	12.00	stabiili
^{13}C (6+7)	13.00	stabiili
^{14}C (6+8)	14.00	5730 vuotta
^{15}C (6+9)	15.01	2.5 s
^{16}C (6+10)		0.7 s
^{17}C (6+11)		190 ms
^{18}C (6+12)		95 ms
^{19}C (6+13)		46 ms
^{20}C (6+14)		14 ms

Vain tietyt protonimäärät atomissa ovat stabiileita.

- esim. hiilellä ($Z=8$) voi olla ytimessään 2-14 neutronia, mutta vain kaksi isotoopia: ^{12}C ja ^{13}C säilyvät hajoamattomina.
- Muut isotoopit hajoavat ja ovat radioaktiivisia.

Isotoopit ja radioaktiivisuus

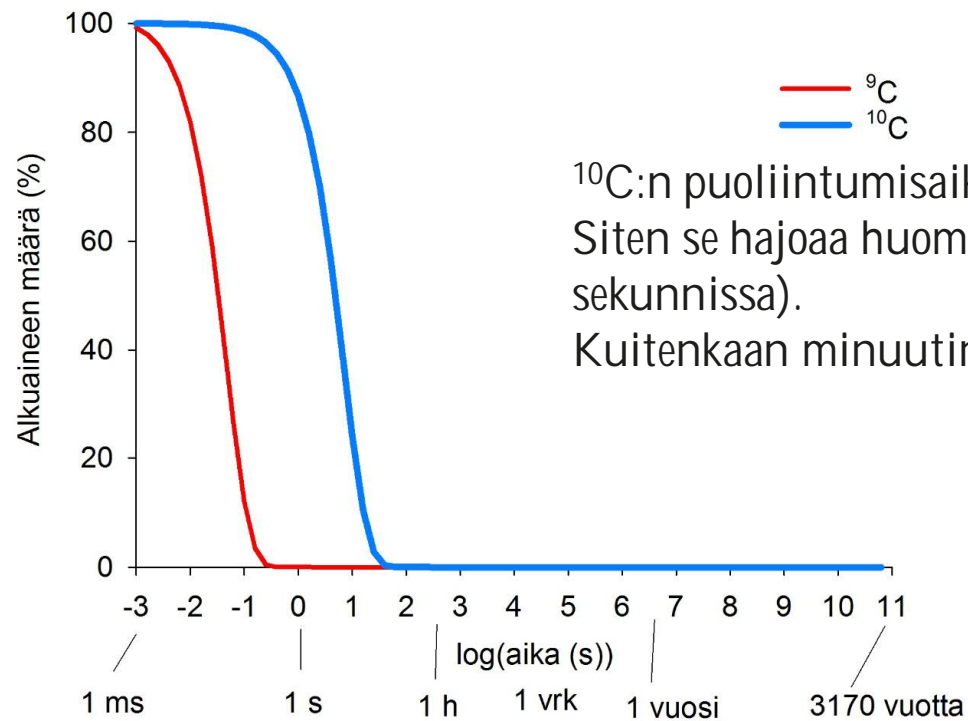


— ${}^9\text{C}$

${}^9\text{C}$:n puoliintumisaika on 127 ms.

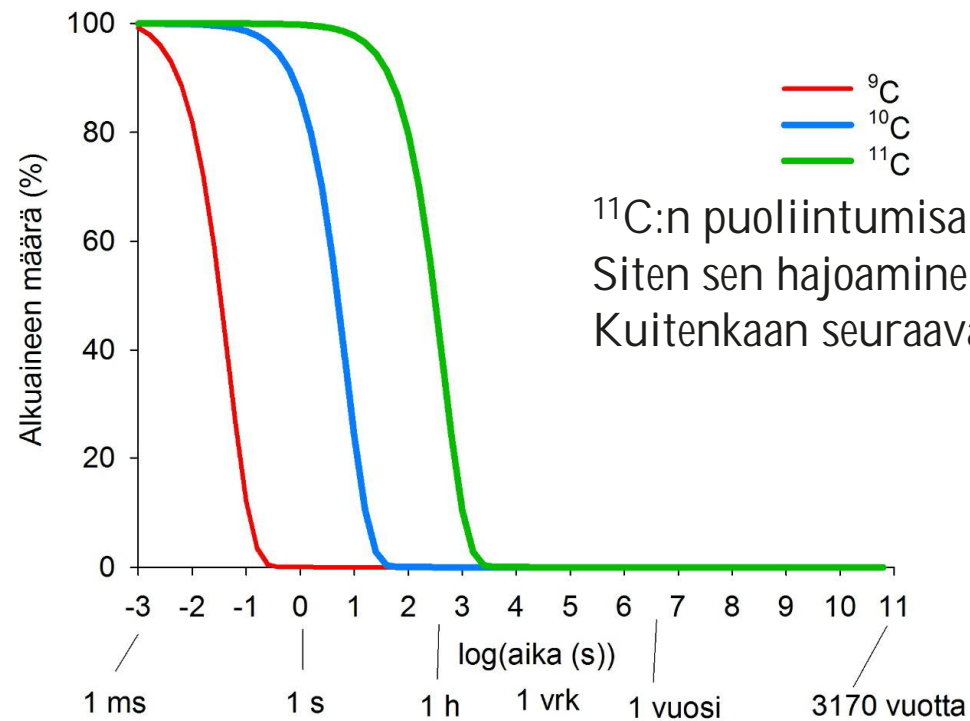
Siten puolet isotoopista on hajonnut reilussa 0.1 sekunnissa eikä sekunnin kuluttua siitä ole jäljellä juuri mitään.

Isotoopit ja radioaktiivisuus



^{10}C :n puoliintumisaika on 9 s.
Siten se hajoaa huomattavasti hitaammin (puoliksi 9 sekunnissa).
Kuitenkaan minuutin kuluttua sitäkään ei enää ole.

Isotoopit ja radioaktiivisuus

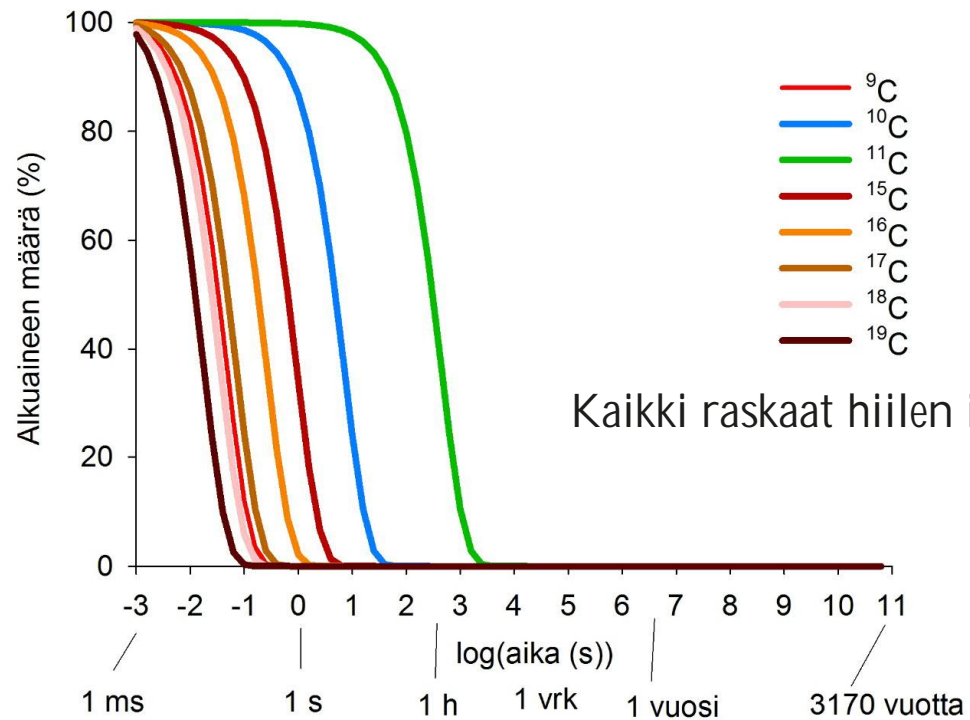


^{11}C :n puoliintumisaika on 20 min.

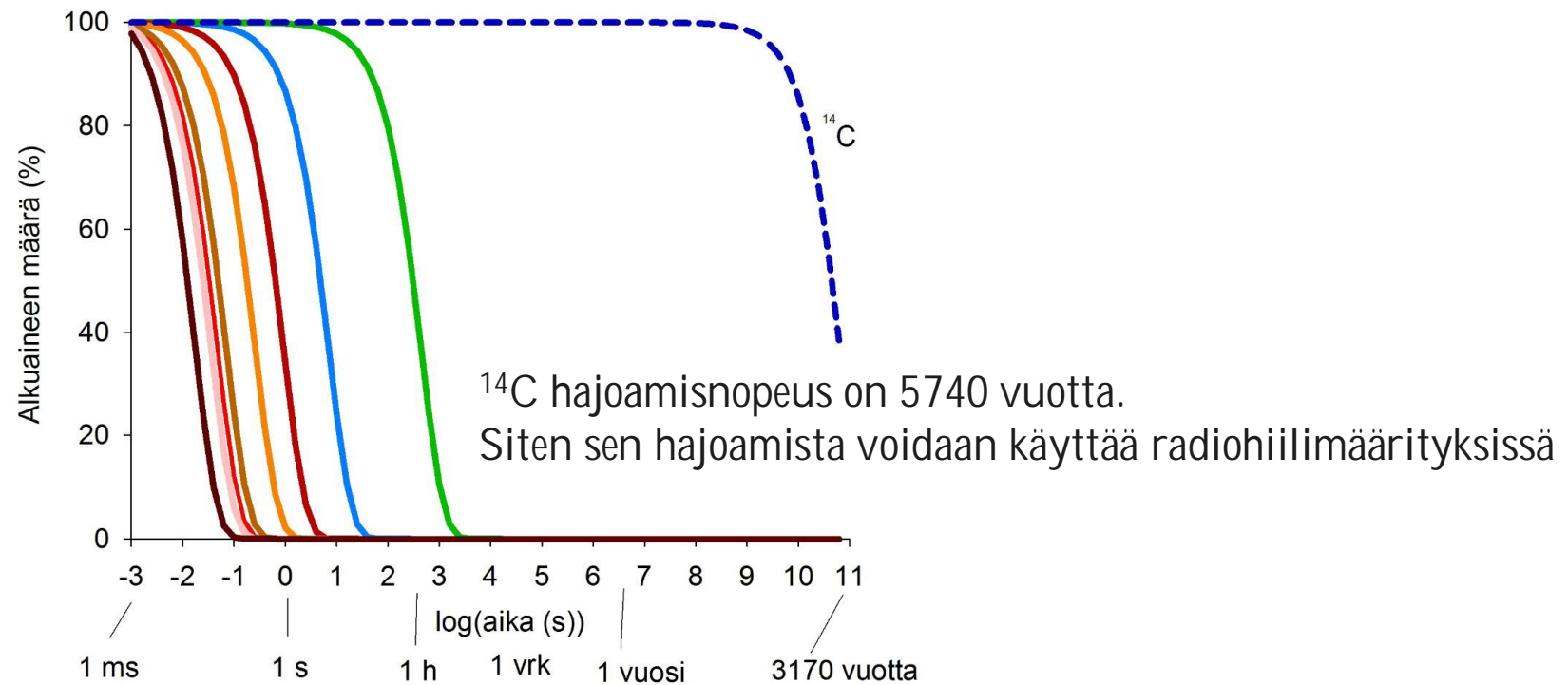
Siten sen hajoaminen on kevyitä hiilen isotooppeja hitaampaa.

Kuitenkaan seuraavana päivänä tätäkään isotooppia ei havaita.

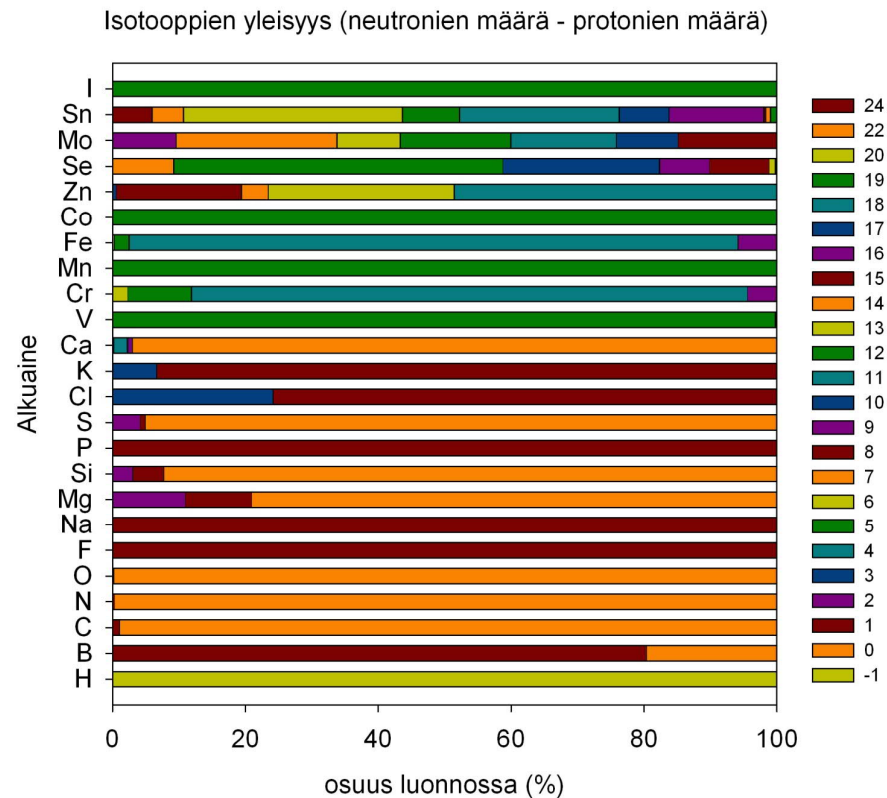
Isotoopit ja radioaktiivisuus



Isotoopit ja radioaktiivisuus



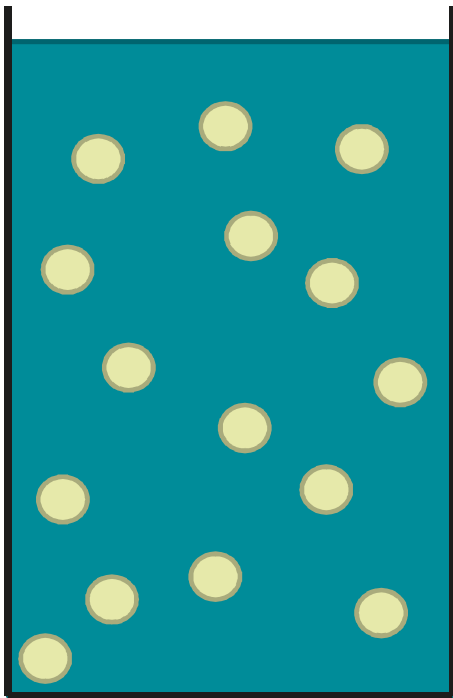
Atomimassa ja isotoopit



Myös stabiilien isotooppien yleisyys vaihtelee.

- Pieniatomisilla alkuaineilla (H...Ca) neutroneita on yleensä suunnilleen yhtä monta kuin protoneita ja erilaisia pysyviä isotooppeja on vähän.
- Raskailla alkuaineilla neutroneita on enemmän kuin protoneita

Ainemäärä



- Aineita mitataan yleensä tilavuuksina (esim. litra, rkl, tl) tai painoina (esim. g)
- Aineet reagoivat kuitenkin sen mukaan, montako molekyyliä kyseistä ainetta on (lukumäärä)
- Lukumäärä voidaan periaatteessa laskea, mutta yleensä se määritetään atomipainon perusteella.
- Lukumäärää ilmoitetaan mooleina, joka on sovittu koostuvan yhtä monesta partikkelista kuin 12 g:ssa hiiltä (^{12}C)

Ainemäärä ja Avokadron vakio

Kun yhden hiiliatomin massa tunnetaan, saadaan tulokseksi Avokadron vakio (N_A).

$$N_A = \frac{12g}{m_{\text{C}}^{12}} = \frac{12g}{12.01u}$$

$$N_A = \frac{12g}{12.0u * \frac{1.66 * 10^{-25}g}{1u}} = 6.022 * 10^{23} \text{ kpl}$$

- Avokadron vakio on siis sovittu suure, jolla molekyylien lukumäärää voidaan ilmaista. Siis vastaava suure kuin tusina (12), tiu (20), mutta vähän enemmän.
- Ainemäärä saadaan jakamalla partikkelien määrä (N) Avokadron vakiolla (N_A)

Moolimassa

Atomien massa ilmoitetaan yleensä moolimassana.

- Alkuaineiden massoja määritettiin edellä atomimassayksikköinä (daltonina). Atomimassayksikkö on määritetty Avogadron vakiosta:

$$u = \frac{1}{N_A}$$

- Yleensä yksittäisten molekyylien massaa ei lasketa vaan ainemäärä (n) lasketaan moolimassalla (M : g/mol], jolloin ainemäärä on massa (m : g) jaettuna moolimassalla.

$$n = \frac{m}{M} \Leftrightarrow M = \frac{m}{n}$$

- Edellä kuvatun hiili¹²:n tapauksessa moolimassaksi voidaan laskea 12g/mol.

Mooli- ja atomimassan yhteys

- Määritetään hapen moolimassa atomimassan avulla

$$M_O = 16u * 1.66 * 10^{-27} \frac{kg}{u} * 6.022 * 10^{23} mol^{-1}$$

$$M_O = 159.9 * 10^{23-27} \frac{kg}{mol} = 159 * 10^{-4} \frac{kg}{mol} = 16 \frac{g}{mol}$$

- Siten moolimassa on lukuarvoltaan sama kuin atomimassa (voimme lukea sen suoraan jaksollisen järjestelmän taulukoista).

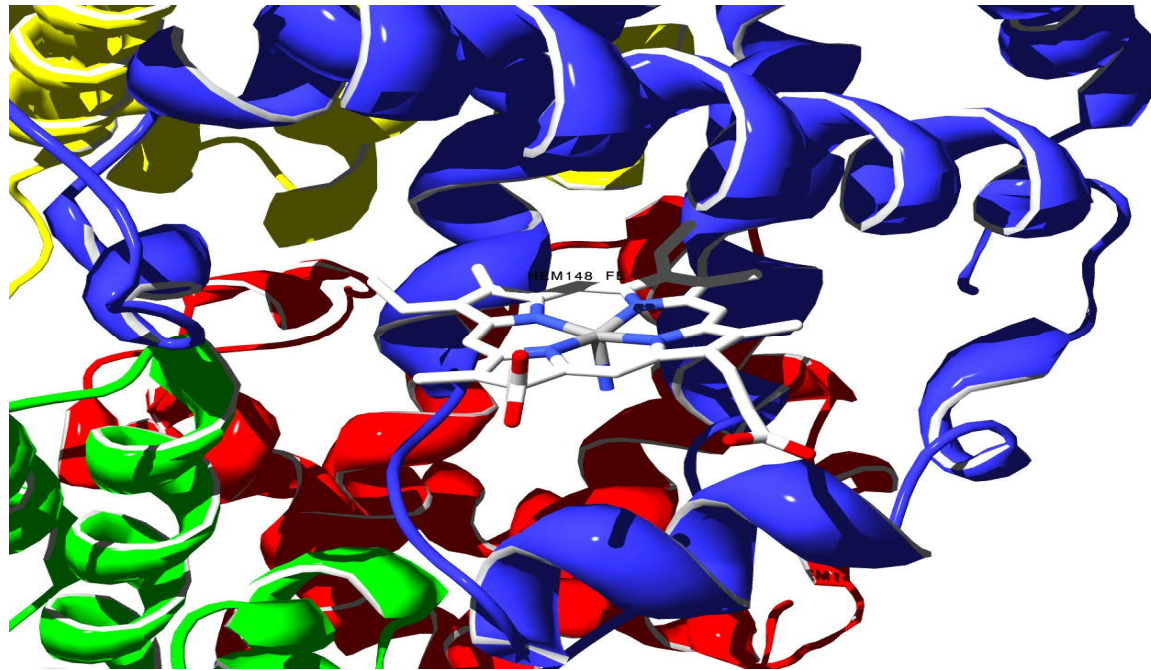
Kiitos!



UNIVERSITY OF
EASTERN FINLAND

uef.fi

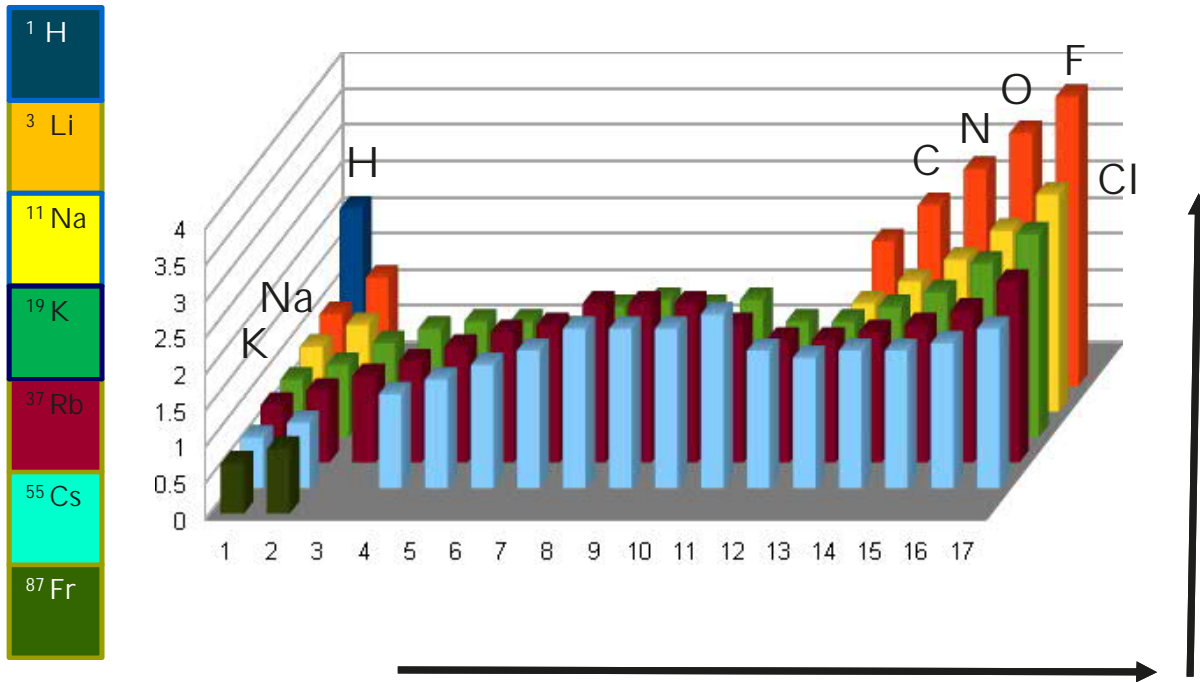




Solu- ja molekyylibiologian perusteet

Jaksollinen järjestelmä: Molekyylien muodostus

Vetävätkö kaikki atomit elektroneja samalla tavalla?

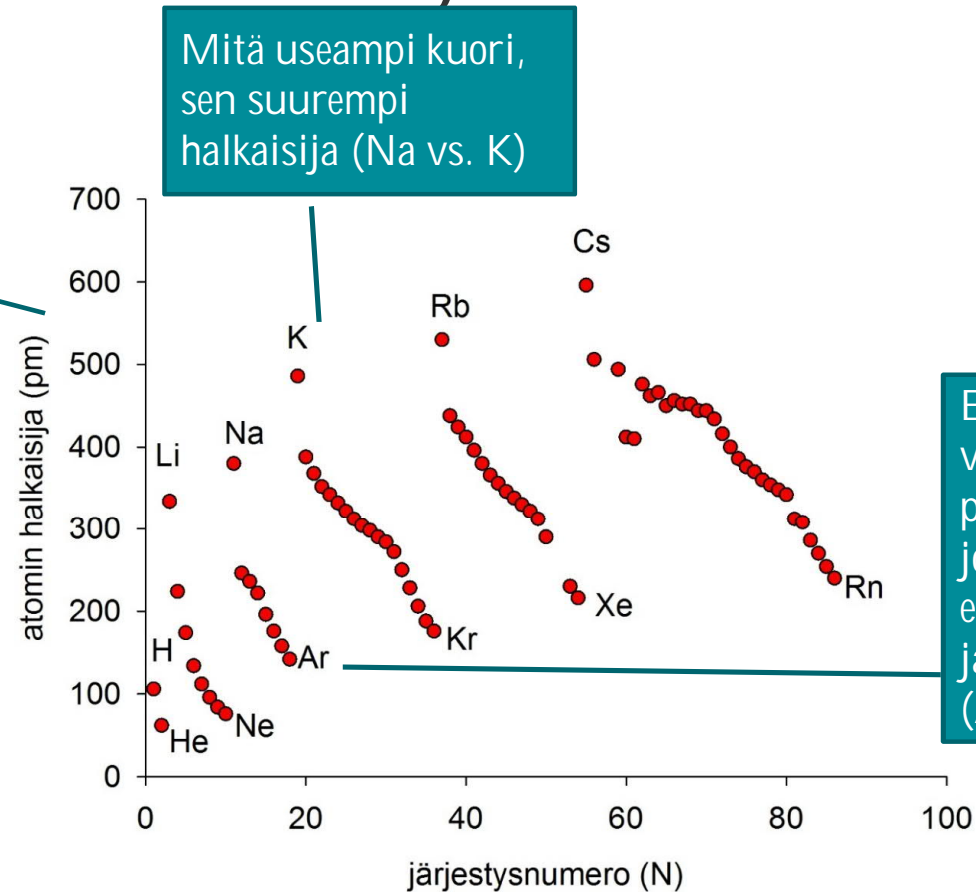


Protonien määrän kasvaminen voimistaa elektronien puoleensa vetämistä

- Kuitenkin vetovoima on heikompi ulommilla elektronikuorilla.
- Siten elektronegatiivisuus kasvaa oikealle ja ylös mentäessä.

Uloimman kuoren miehitys vaikuttaa atomien kokoon

Atomin koko riippuu elektronikuorten määrästä ja miehityksestä.



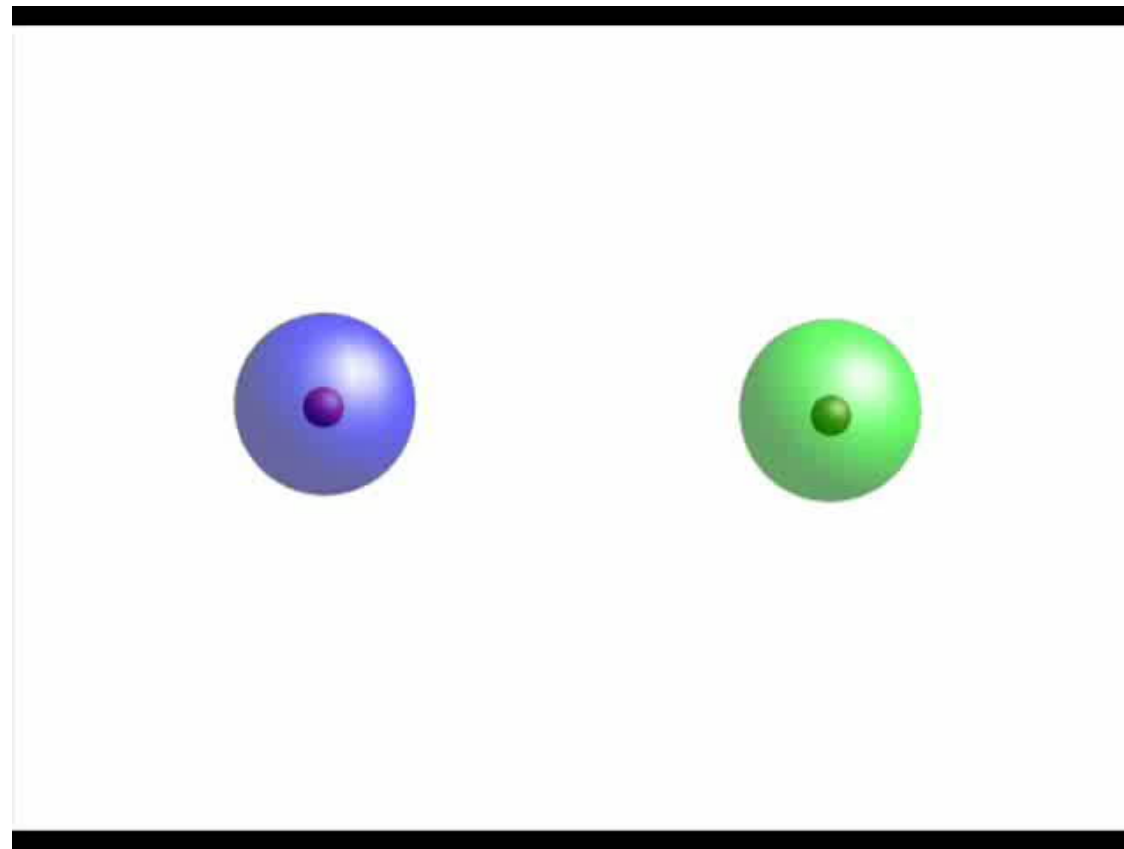
Elektronegatiiviset alkuaineet vetävät elektroneja tehokkaammin puoleensa, kuitenkin halkaisija ei johdu suoraan elektronegatiivisuudesta vaan jalokaasuilla halkaisija on pienin (Ar vs Na)

Atomien törmätessä voi muodostua molekyylejä

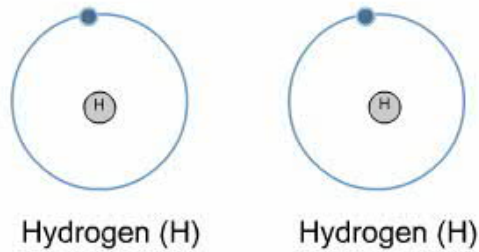
Atomien törmäämistä tapahtuu jatkuvasti.

- Mikäli törmäävät atomit vetävät elektroneja puoleensa suunnilleen samalla tavalla, ne voivat jakaa elektroneja (muodostuu kovalenttinen sidos)
- Atomit pyrkivät täyteen uloimpaan elektronikuoreen (valenssikuori)
 - Oktettisääntö
 - Esim. kloori ottaa mielellään elektronin ja natrium luovuttaa
- Mikäli atomien elektronegatiivisuus eroaa, muodostuu poolinen sidos, jossa elektronit jakautuvat epätasaisesti (esim. H_2O)
- Mikäli elektronegatiivisuus eroaa paljon, muodostuu ionisidos, jossa elektroni kokonaan luovutettu toiselle atomille (esim. NaCl).

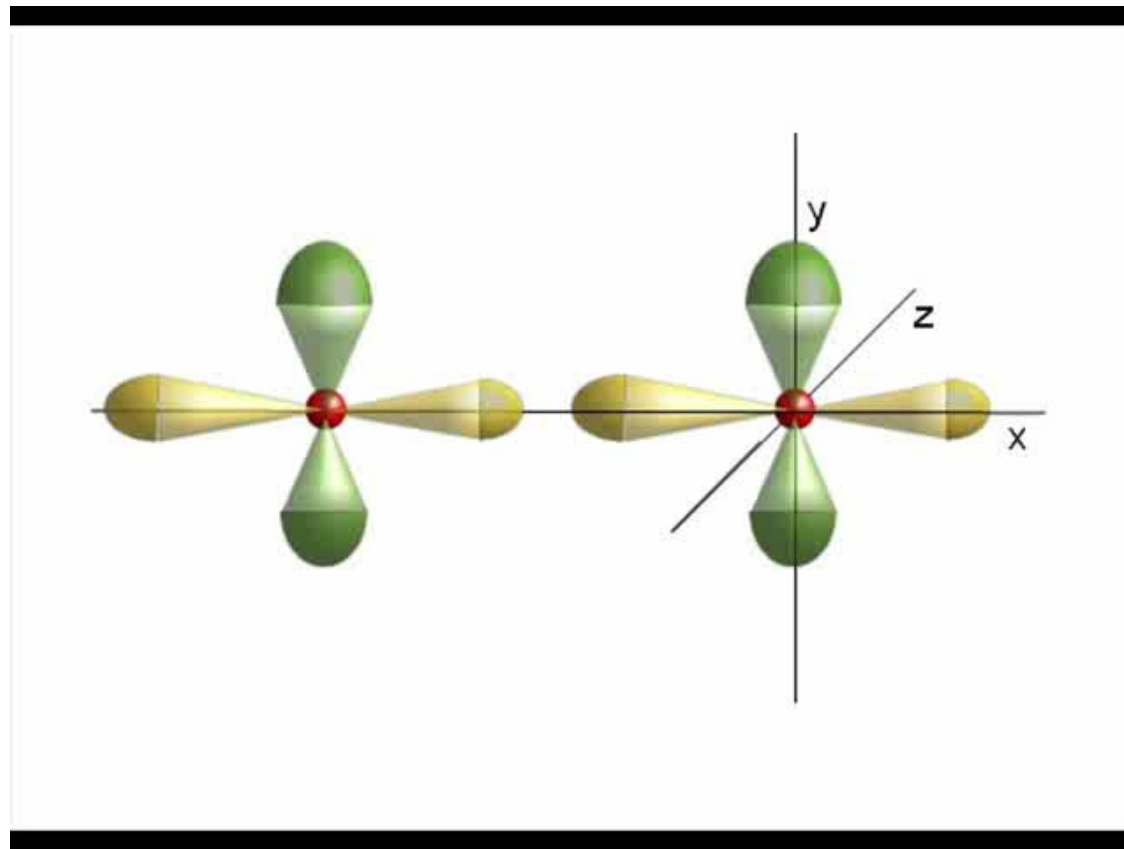
Atomien törmääminen: pallomaiset s-orbitaalit



...näin muodostuu esim. vetykaasu



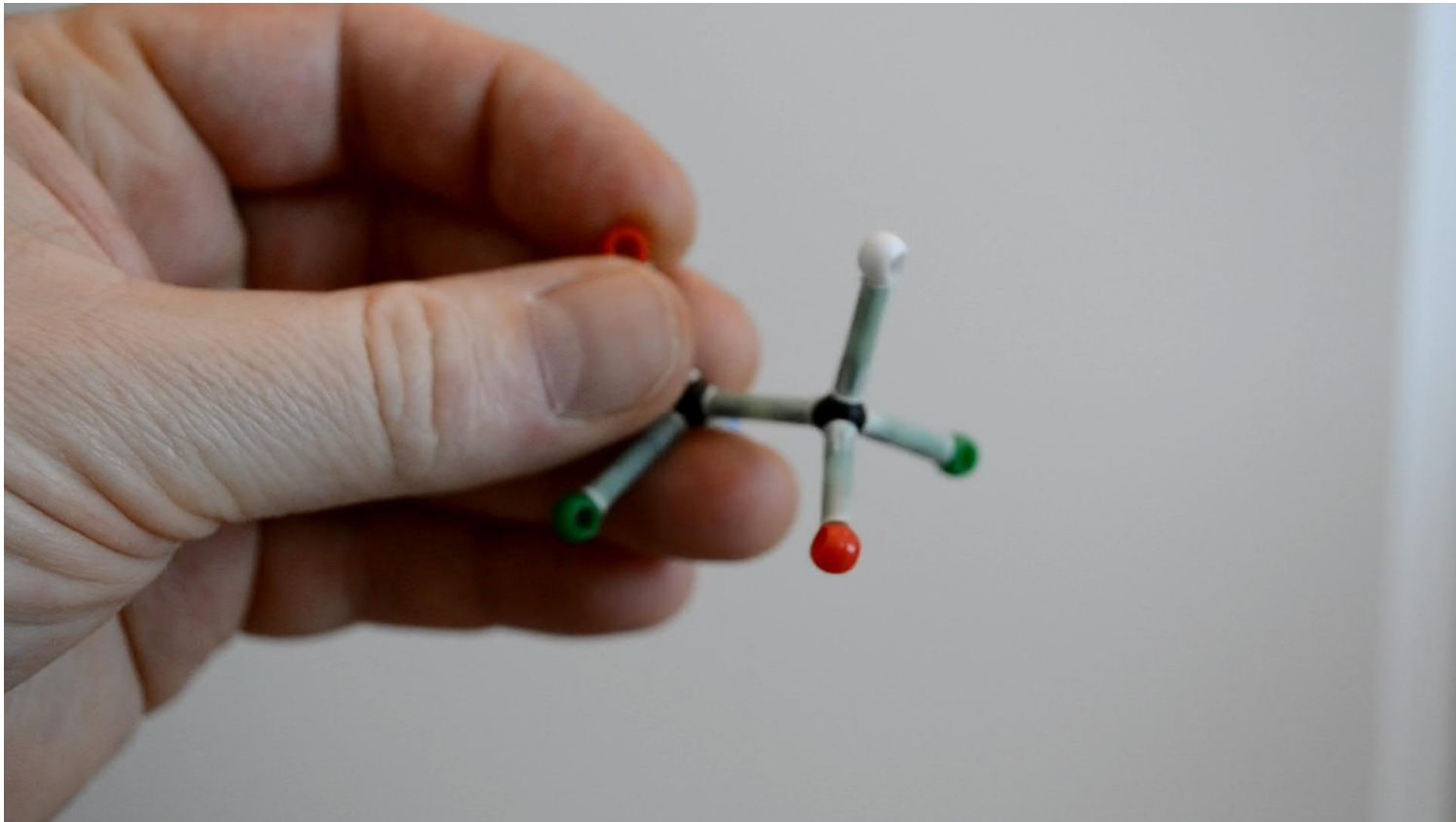
Kaksoissidoksen muodostus



Molekyylejä muodostuu, kun yksi tai useampi elektroni-pari jaetaan.

Yhdisteestä riippuen, siinä esiintyy erilaisia kovalenttisia sidoksia

- Yksinkertaiset (σ -)sidokset muodostuvat, kun yksi elektronipari on jaettu.
 - Liitos on joustava
- Kaksoissidos muodostuu, kun sigma-sidoksen lisäksi muodostuu p-orbitaalien välille ns. π -sidos.
 - Atomien pyöriminen estyy
- Mikäli atomien väliin muodostuu kaksi π -sidosta, on kyseessä kolmoissidos.
 - Rakenne on jäykkä "sauvamainen"

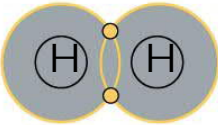
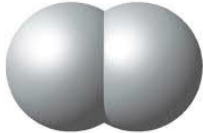


Kemialliset reaktiot

Molekyylin muodostumista voidaan tarkastella reaktioyhtälöllä



- Yksinkertaistettuna reaktioyhtälö kuvaa, että ainetta ei häviä. Lisäksi kaksisuuntainen nuoli kuvaa, että reaktio voi tapahtua molempiin suuntiin
 - Veden tapauksessa hajoaminen (dissosiaatio) on epätodennäköistä ja vaatii paljon energiaa (kuvattu Δ :lla).
- Yhdisteen molekyylikaava (H_2O) kuvaa sen raaka-aineet, muttei välttämättä kerro mitään sen rakenteesta.
 - Veden tapauksessa vaihtoehtoisia tapoja muodostaa 2 vedyn ja yhden hapen molekyyliä ei ole.

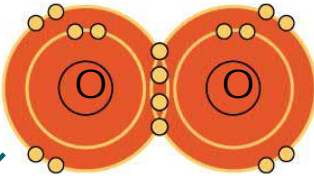

Nimi ja molekyyli-kaava	Elektronien jakautuminen	Lewisin pistekaava ja rakennekaava	Pallomalli
(a) Vety (H_2)		$H:H$ $H-H$	

Lewisin pistekaavassa liitoksen muodostavat elektronit on merkitty pisteinä

Vetymolekyyli koostuu kahdesta vetyatomista, jotka jakavat yhden elektroniparin.

Molekyyli voidaan merkitä molekyylikaavan lisäksi rakennekaavalla, josta ilmenee s-sidos atomien välillä

Todellinen rakenne muistuttaa pallomallin mukaista pötkylää, jossa elektronit sijaitsevat jossain muodostuneella molekyyliorbitaalilla

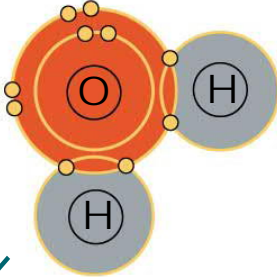
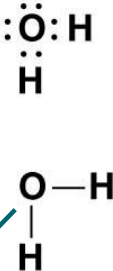

Nimi ja molekyyli-kaava	Elektronien jakautuminen	Lewisin pistekaava ja rakennekaava	Pallomalli
(b) Happi (O ₂)		$\ddot{\text{O}}::\ddot{\text{O}}$ $\text{O}=\text{O}$	

Lewisin pistekaava osoittaa sidokseen kuulumattomat valenssielektronit, jotka vaikuttavat mm. hapen reaktiivisuuteen.

Happimolekyyli koostuu kahdesta happiatomista, jotka jakavat kaksi elektroniparia.

Kaksoissidos merkitään rakennekaavassa kahdella viivalla

Pallomalli näyttää samalta kuin vedyllä

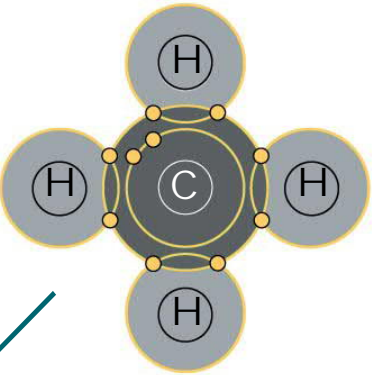
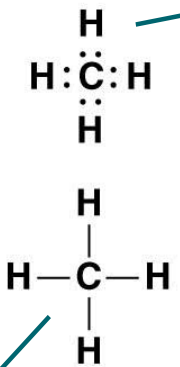
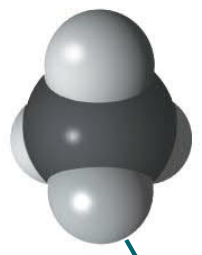
Nimi ja molekyyli-kaava	Elektronien jakautuminen	Lewisin pistekaava ja rakennekaava	Pallomalli
(c) Vesi (H_2O)			

Lewisin pistekaava esittää hapen vapaat elektroniparit, jotka tarvitsevat tilaa, jolloin vedyt eivät ole toisiaan vastapäätä

Vesimolekyyli koostuu kahdesta vety- ja yhdestä happiatomista, jotka jakavat yhden elektroniparin.

Rakennekaava osoittaa, että sidoksiin on käytetty yksi elektronipari

Pallomalli eroaa edellisistä, koska molekyyli taipuu hapen kohdalta. Molekyyli on poolinen, koska happi vetää elektroneja enemmän puoleensa

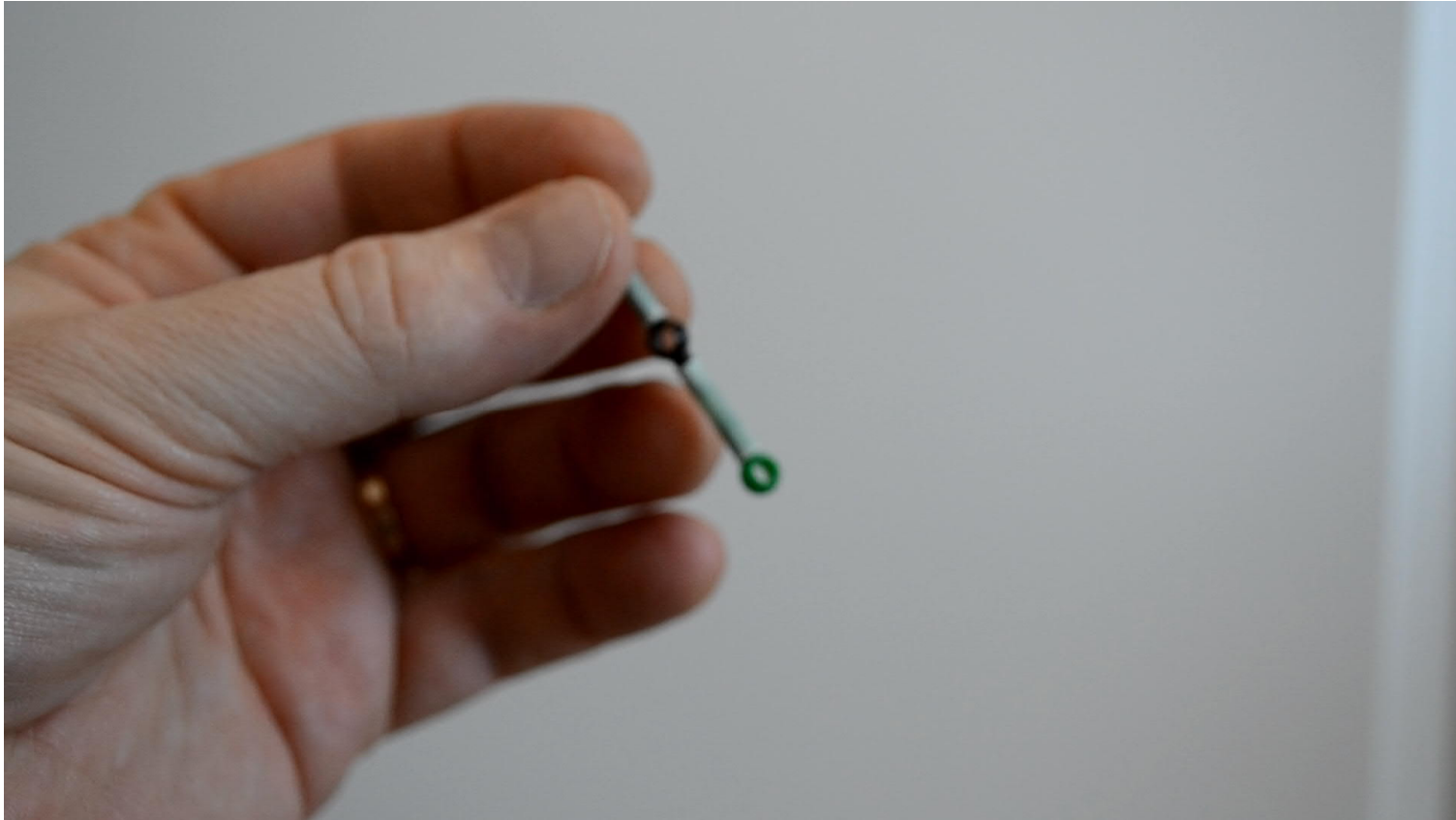
Nimi ja molekyyli-kaava	Elektronien jakautuminen	Lewisin pistekaava ja rakennekaava	Pallomalli
(d) Metaani (CH ₄)			

Lewisin pistekaava esittää kaikkien hiilen elektronien liittymisen sidoksiin

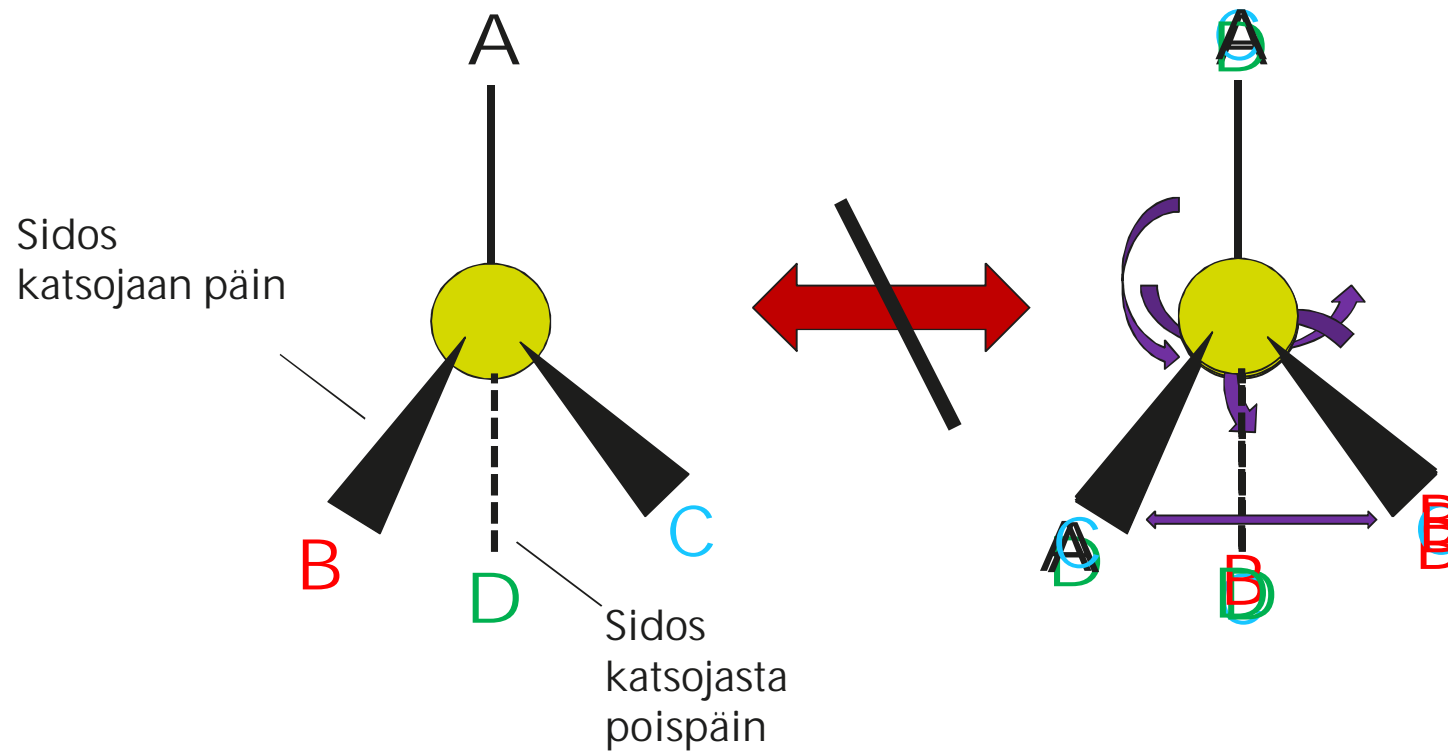
Metaani koostuu neljästä vety- ja yhdestä hiiliatomista, jotka jakavat yhden elektroniparin

Rakennekaava osoittaa, että sidoksiin on käytetty yksi elektronipari

Pallomallissa vedyt sijaitsevat eri puolilla, jotta elektronit ovat mahdollisimman kaukana toisistaan



Molekyyli pääsee kääntymään yksinkertaisten sidosten ympäri, mutta sidokset eivät vaihda paikkaa



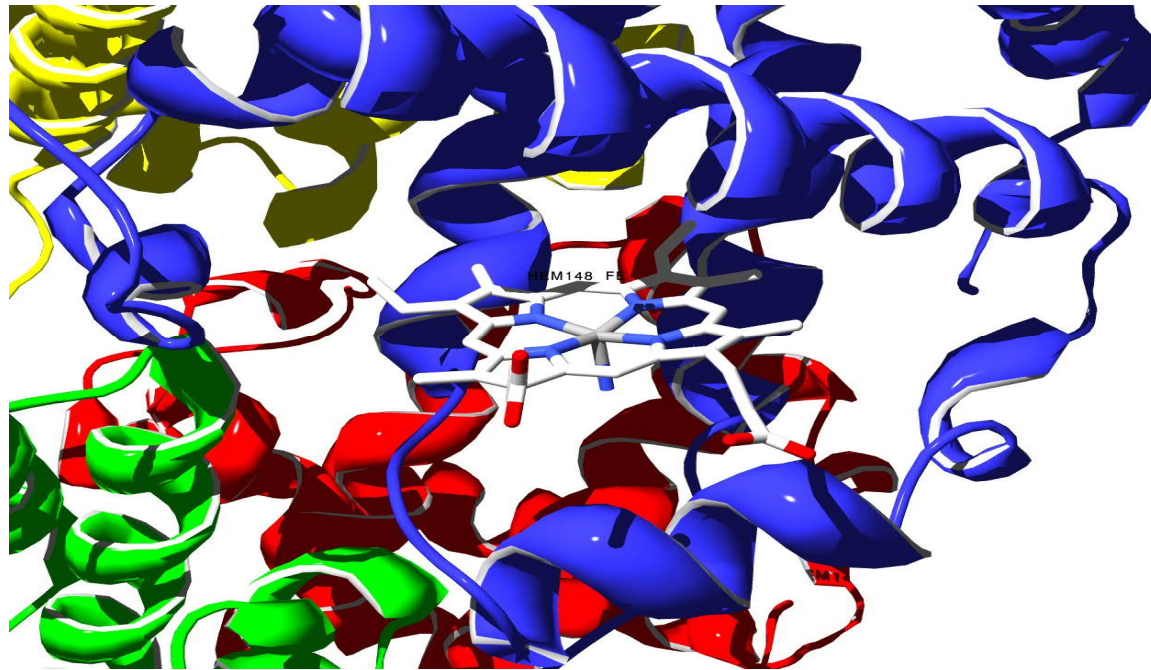
Kiitos!



UNIVERSITY OF
EASTERN FINLAND

uef.fi





Solu- ja molekyylibiologian perusteet

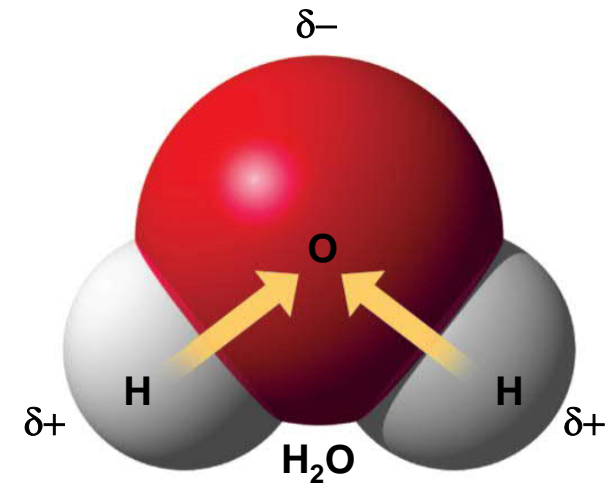
Jaksollinen järjestelmä:

Vuorovaikutustyytit ja elektronien jakautuminen sidoksissa

Elektronien jakautuminen sidoksissa

Kovalenttiset sidokset eivät jaa aina elektroneja tasan

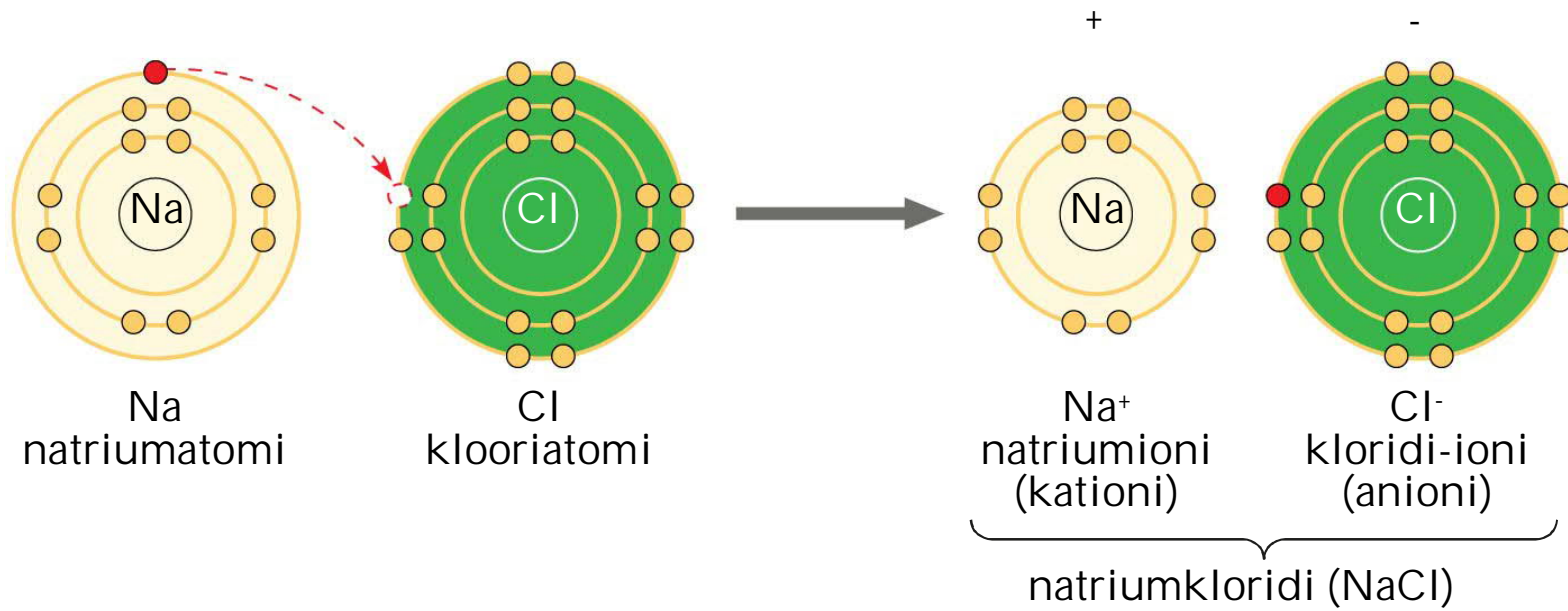
- Poolittomissa sidoksissa atomien elektronegatiivisuus on samanlainen, jolloin elektronit tasaisesti molempien atomien ympärillä
 - Esim. hiilivedyt
- Poolisissa sidoksissa elektronegatiivisempi atomi vetää enemmän elektroneja puoleensa.
 - Esim. vesimolekyylissä yhteiset(kin) elektronit lähinnä happiatomilla.

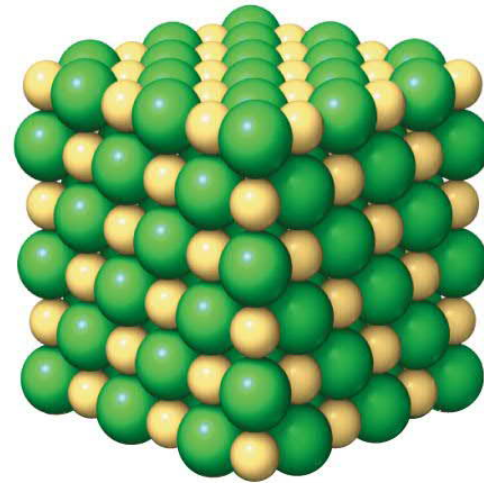


Ionisidokset

Mikäli atomien elektronegatiivisuus eroaa suuresti, ne eivät muodosta kovalenttisia sidoksia lainkaan.

- Elektronegatiivinen atomi voi ryöstää elektronin kokonaan itselleen, jolloin syntyy negatiivisesti varautunut anioni.
 - Vähän elektronia puoleensa vetävä atomi voi luovuttaa elektronin, jolloin syntyy positiivisesti varautunut kationi
 - Esim. $\text{Na} + \text{Cl} \rightarrow \text{Na}^+ \text{Cl}^-$
- Erimerkkiset varaukset vetävät toisiaan puoleensa, jolloin muodostuu ionisidos.
 - Ionisidokset katkeavat vesiliuoksessa, jolloin ionit vapautuvat liuokseen: suolat liukenevat.





Heikot kemialliset vuorovaikutukset

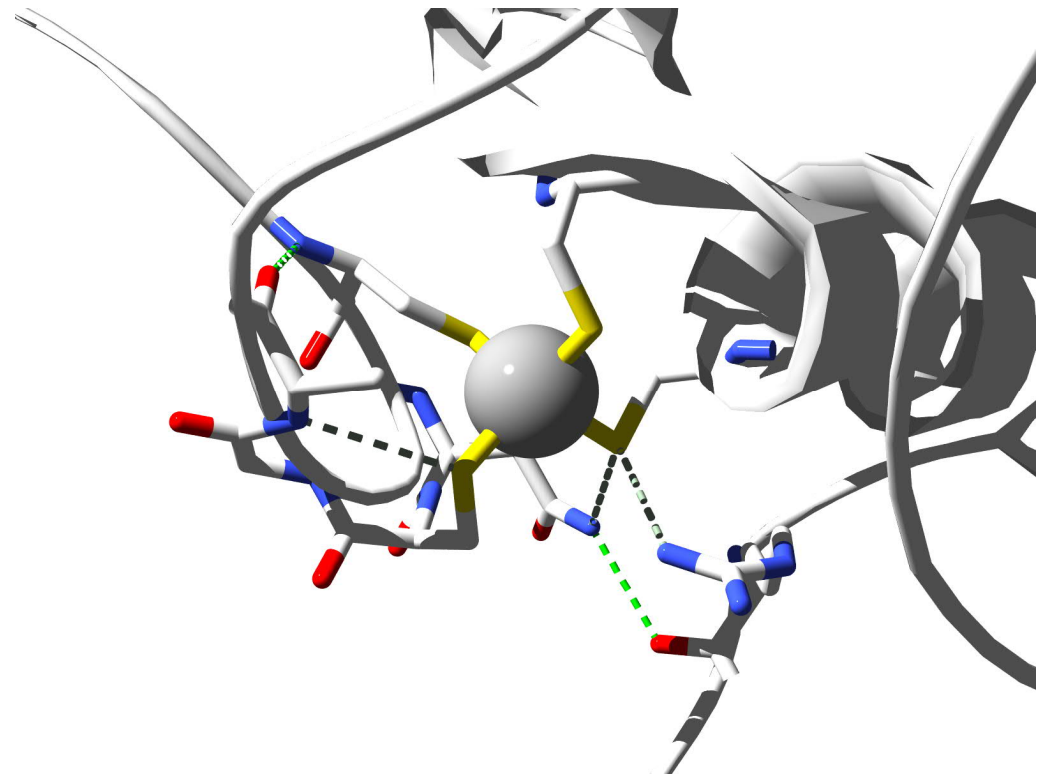
Kovalenttisen ja ionisidoksen lisäksi molekyylit vetävät toisiaan puoleensa erilaisilla "heikoilla" vuorovaikutuksilla

- Ionien ja poolisten molekyylien välillä ioni-dipoli-vuorovaikutuksia
 - Ioni voi joskus myös indusoida dipolin poolittomaan molekyyliin
- Poolisten molekyylien välillä dipoli-dipoli-vuorovaikutuksia
 - Elektronegatiivisten atomien välille voi syntyä vetysidoksia
- Vety molempien elektronegatiivisten atomien käytössä
- Varauksettomien atomien välillä voi olla hyvin heikkoja Van der Waals-voimia
 - Esim. vierekkäisten hiiliketjujen välillä voi esiintyä vetovoimaa

Ioni-dipoli-vuorovaikutus

Monissa metalliproteiineissa metalli on erittäin tiukasti kiinni proteiinin rakenteessa.

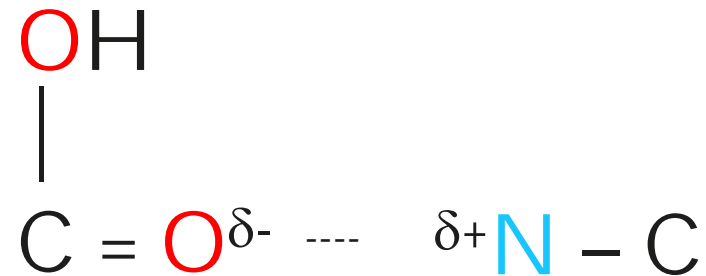
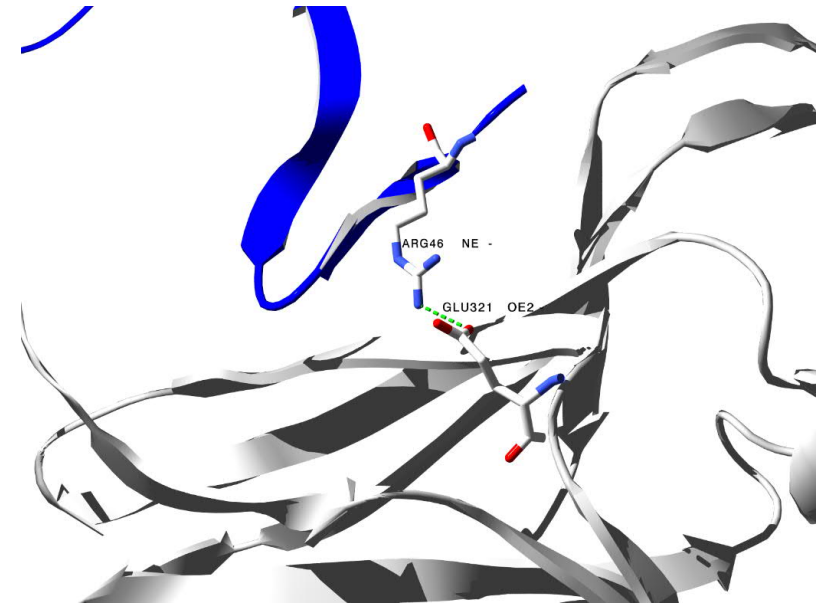
- Esim. DNA:han kiinnittyvä GATA sisältää sinkkiä, joka on kiinnittynyt neljään rikkiatomiin.
- Molekyylissä Zn-S sidoksen pituus on 230 pm (2.3 Å), mikä on sama kuin kyseisten atomien säteiden summa.
- Kuvan katkoviivat esittävät rakennetta tukevia vetysidoksia.



Dipoli-dipoli-vuorovaikutus

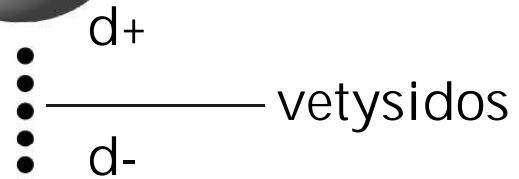
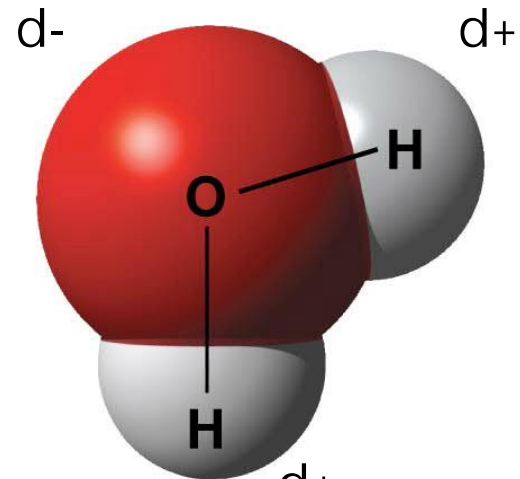
Molekyylit, joilla elektronit ovat epätasaisesti jakautuneet, vuorovaikuttavat toistensa kanssa

- Erona edellisiin on kovalenttinen sidos
 - (esim. -COO^-)
- (osittais-)varaukset tai vuorovaikuttavat keskenään, mikä on tärkeää esim. proteiinien oikealle laskostumiselle.
 - Esim. Kir2 proteiinin eri domeenit ovat kiinni toisissaan dipoli-dipoli-vuorovaikutuksella, jossa varaukset ovat erittäin lähekkäin (etäisyys 2.7\AA , mikä on 2-kertaa enemmän kuin atomien säteiden summa).

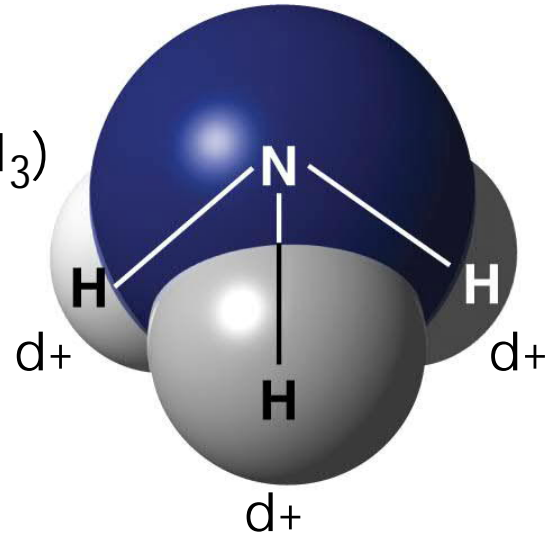


Vetysidos

Vesi (H_2O)



Ammoniakki (NH_3)



Van der Waals -vuorovaikutukset



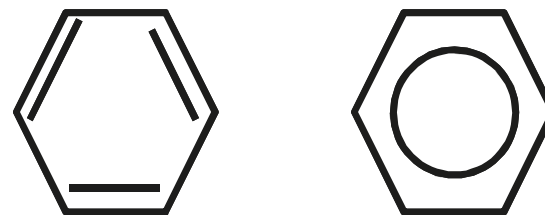
Myös molekyylit, joilla varaus ei ole epätasaisesti jakautunut, voivat vuorovaikuttaa keskenään.

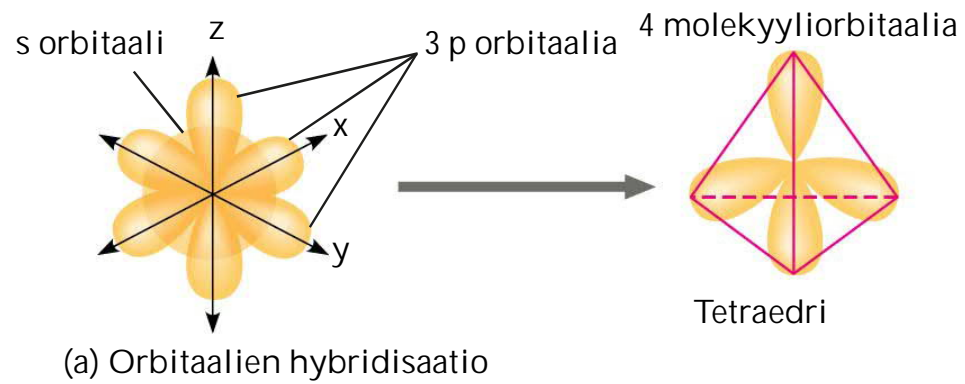
- Mikäli varaus syystä tai toisesta jakautuu epätasaisesti, syntyvä dipoli voi synnyttää dipolin viereisessä molekyylissä.
- Voimat ovat erittäin heikkoja, mutta ne riittävät pitämään esim. gekko-liskon sileässä seinässä.
- vdW-voimia käytetään mm. molekyylin kiinnittymiseen proteiineihin ja DNA:han.
- Määrittäminen vaikeaa (vaatii kvanttimekaniikkaa).

Molekyyliorbitaalit

Molekyylin muodostuessa atomien orbitaalit yhdistyvät, jolloin muodostuu molekyyliorbitaaleja.

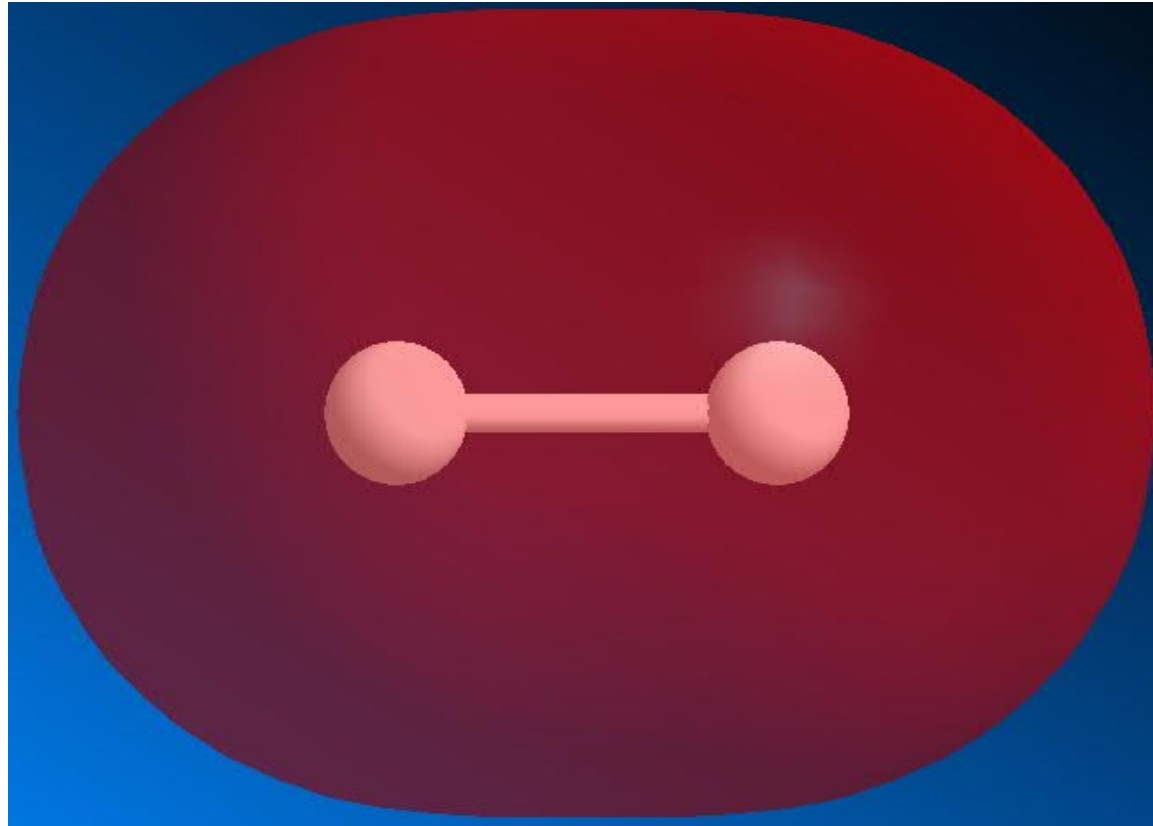
- Elektronit voidaan jakaa usean atomin kesken.
- Erityisesti joka toisessa sidoksessa sijaitsevat kaksoissidokset ovat "delokalisoituja"
 - Näissä konjugoiduissa kaksoissidoksissa jokainen sidos on samanlainen
 - esim. bentseeni-rengas



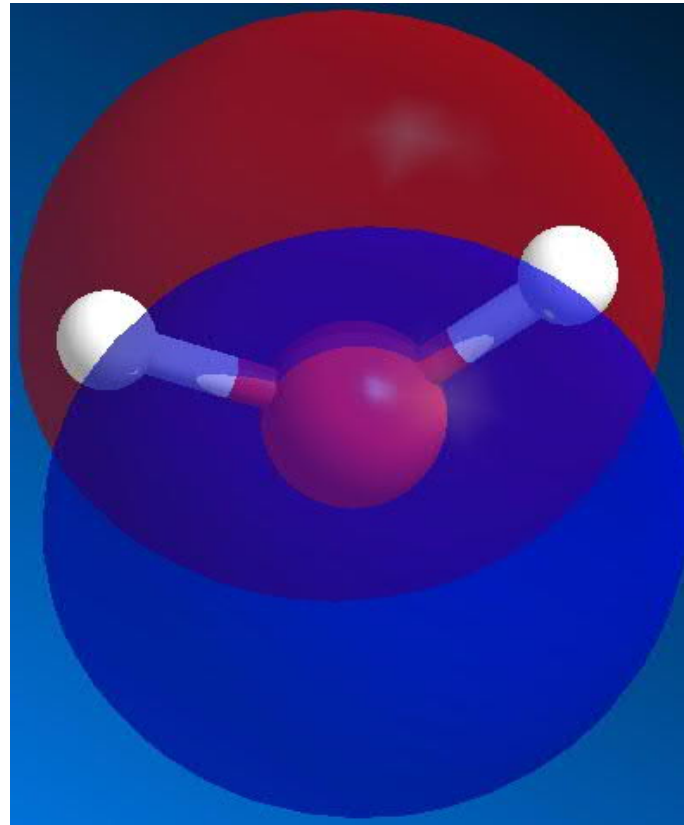


Pallo-malli	Pallo-ja-tikku-malli	Hybridiorbitaalit
<p>Vesi (H₂O)</p>	<p>104.5°</p>	<p>Vapaa elektroni-pari</p>
<p>Metaani (CH₄)</p>		

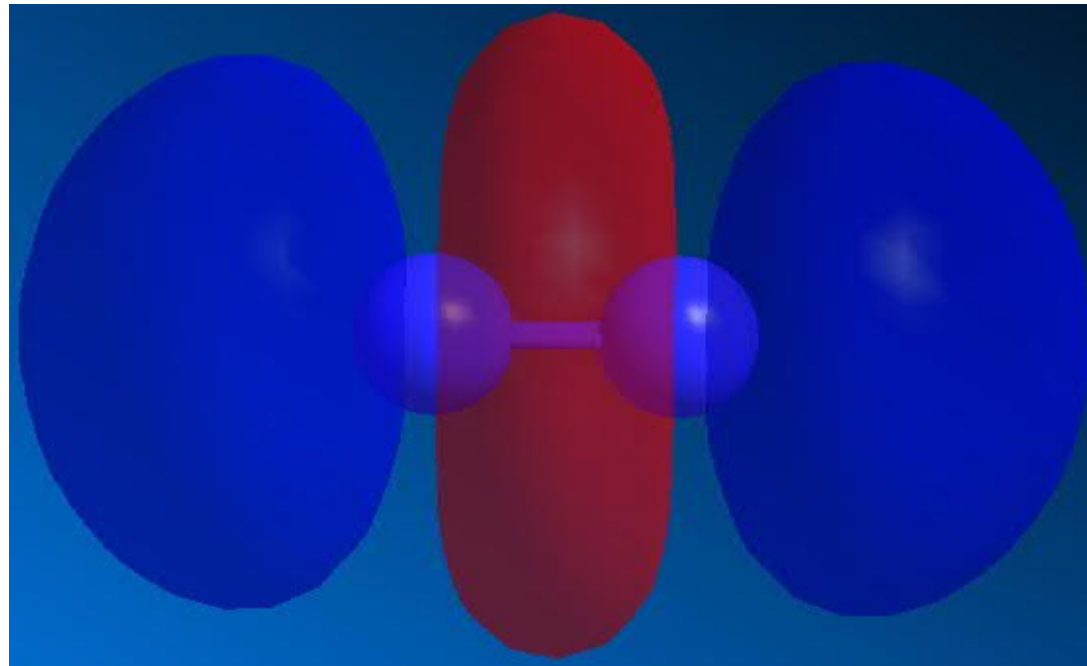
Vedyllä elektronitiheys on tasaisesti ympäri molekyyliä



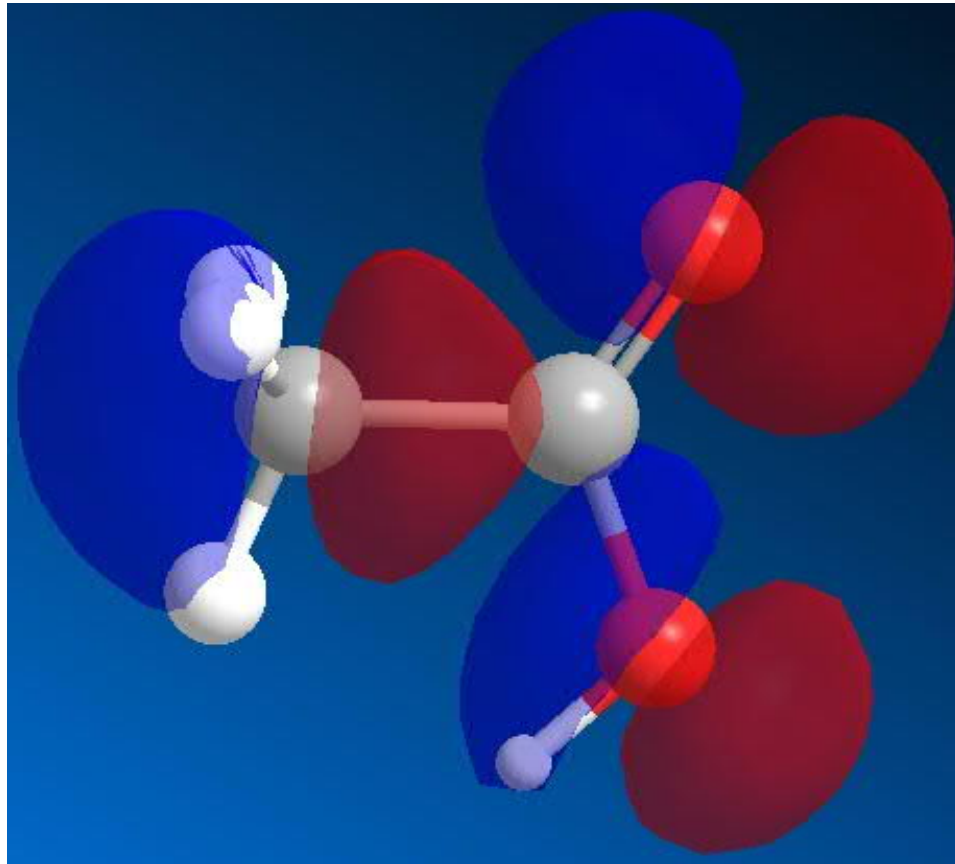
Vesimolekyylissä elektronitiheys on suurempi hapella, jolla on korkeampi elektronegatiivisuus.



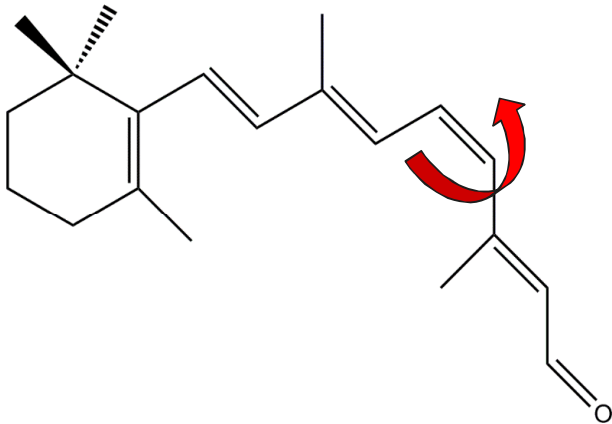
Typpimolekyylissä on kolmoissidos, jolloin elektronitiheyttä on renkaana atomien välissä ja lisäksi molekyylin päissä.



Etikkahapossa havaitaan elektronitiheyden jakautumista sidosten kesken ja kaksoissidoksen aiheuttamaa elektronitiheyttä sidoksen vieressä.



Molekyyliorbitaalit ja näkeminen



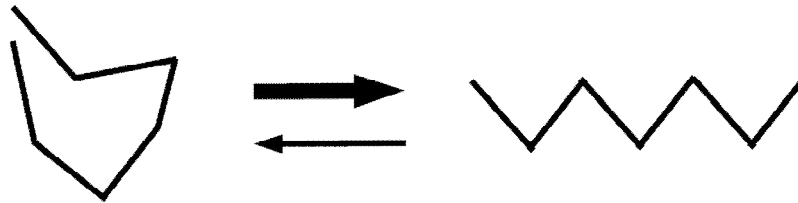
Retinaalissa on 6 kaksoissidosta, jotka sijaitsevat joka toisessa sidoksessa.

- Tällaiset yhdisteet ovat yleensä värillisiä eli niissä on elektroneja, jotka virittyvät näkyvän valon energialla.
- Retinaalin tapauksessa valon imeytyminen virittää yhden elektronin, jolloin kaksoissidos katkeaa hetkeksi.
- Katkeamisen seurauksena molekyyli voi kääntyä. Kääntyminen havaitaan retinaaliin kiinnittyneessä proteiinissa, mikä laukaisee valoaistimuksen silmässä.

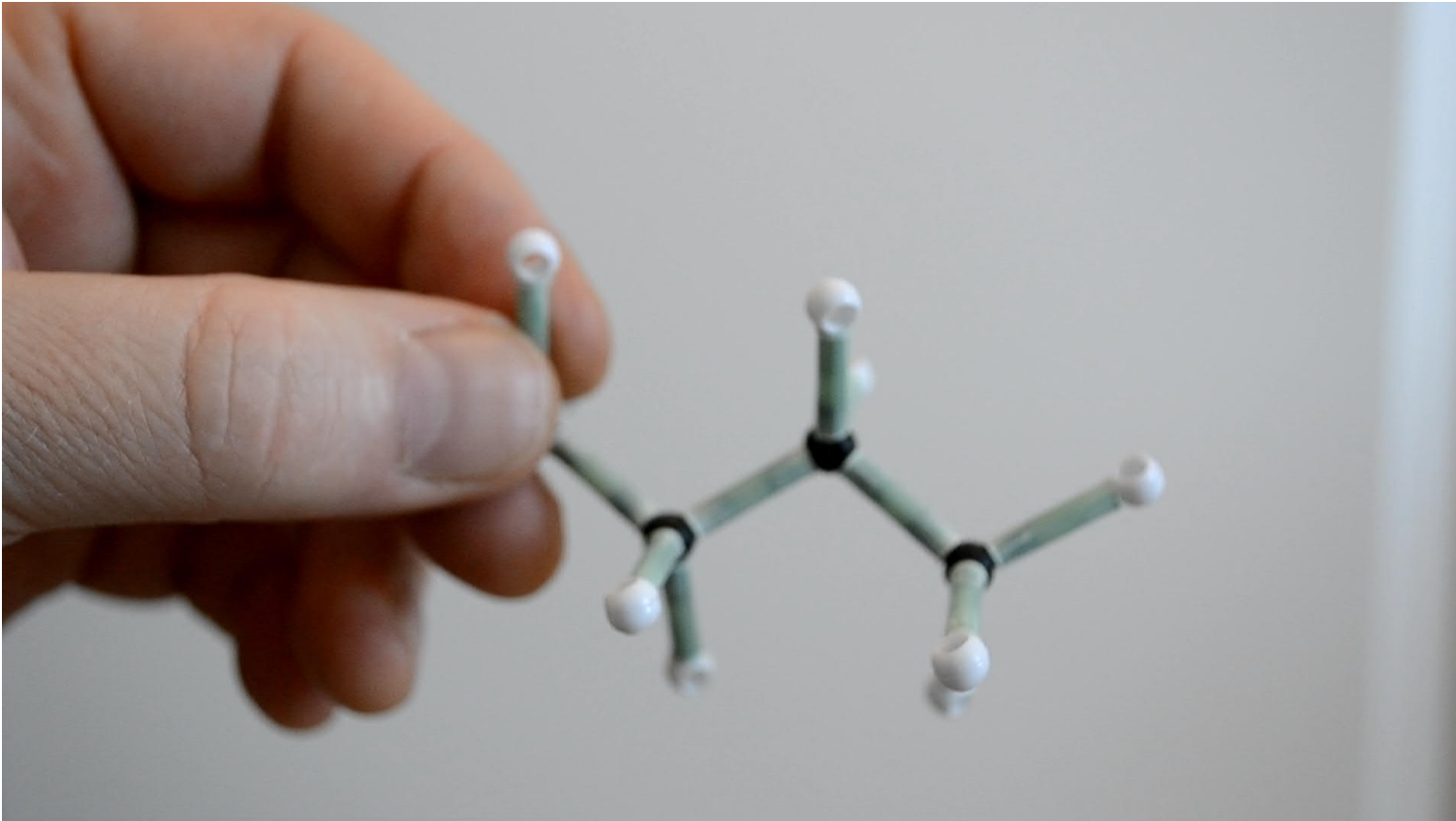
Kemiallisen rakenteen määräytyminen ja merkitys

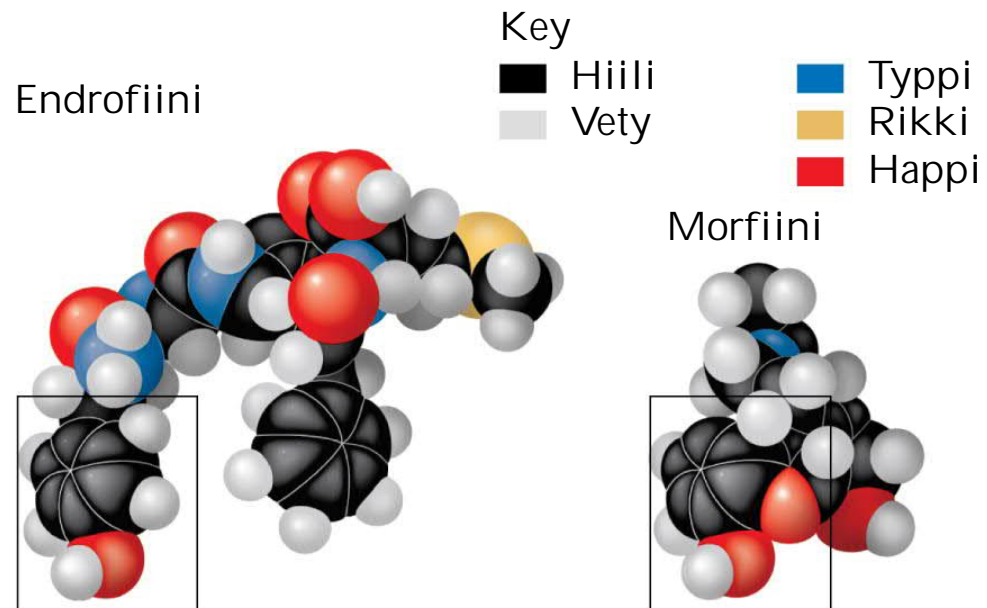
Yhdisteet pyrkivät mahdollisimman matalaenergiseseen rakenteeseen

- Atomit eivät törmäile toisiinsa yhdisteessä vaan sidokset pyrkivät mahdollisimman kauas toisistaan
- Energiaperiaate mahdollistaa rakenteen ennustamisen (molekyylihallituksen).

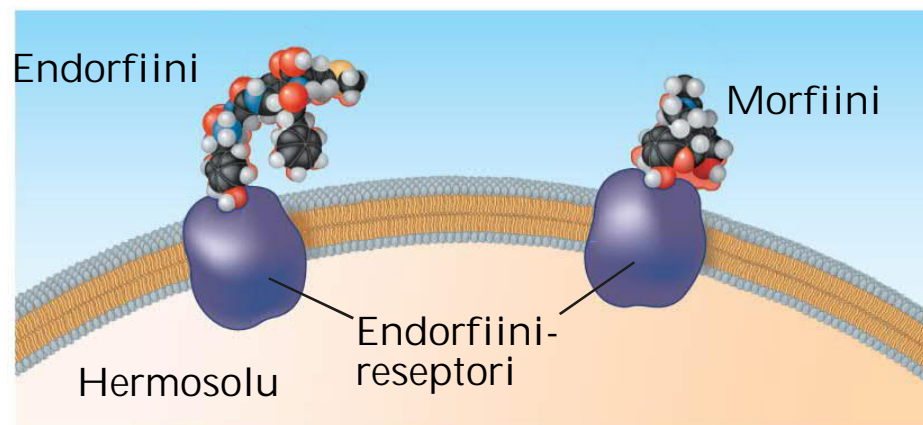


- Molekyylin rakenne on tärkeä sen toiminnalle ja spesifisyydelle
 - Rakenne auttaa molekyyliä tekemään halutun toimenpiteen, mutta samalla estää sivuvaikutuksia.
- Samankaltaiset rakenteet voivat matkia toisiaan





(a) Endorfiinin ja morfiinin rakenne



(b) Sitoutuminen endorfiinireseptoriin

Kiitos!



UNIVERSITY OF
EASTERN FINLAND

uef.fi

