

2011.09.14. sz

Biofizika

10. oldal

hátsóbeli vizsga, kolimitáció

makroszkópikus világ, termodinamika

mikroszkópikus világ, atomok, kölcsönhatásaik

kvantummechanika, Schrödinger-eg

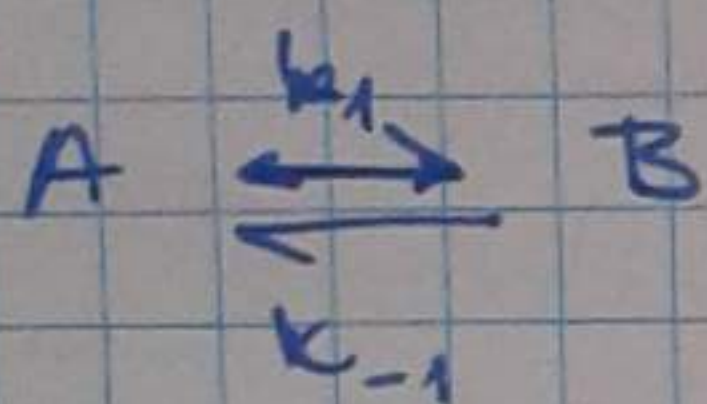
☺

☺

+ a kettő között: statisztikus fizika

Kinetika

elő re-k : ~~az~~ folyamatok jellemzői



reverzibilis

k_1 : sebesség: állandó

k_{-1} :

dinamikus egyensúly: azonos intenzitású az oda-
és a visszaalakulás, "nem történik semmi"

egyensúly: koncentráció: $[A]_e$ és $[B]_e$

egyensúly: állandó: $\frac{[B]_e}{[A]_e} = \text{állandó} = K_{eq} = \frac{k_1}{k_{-1}}$

Gibbs féle standard szabadenergia:

$$\Delta G^\circ = -R \cdot T \cdot \ln \frac{[B]_e}{[A]_e} \quad \begin{matrix} \rightarrow \text{ami munkára (hasznosítható)} \\ \text{(munkameghozás, ami káros)} \end{matrix}$$

(st. szabadenergia)

standard áll: 293 K, 10^5 Pa, $c = 1$

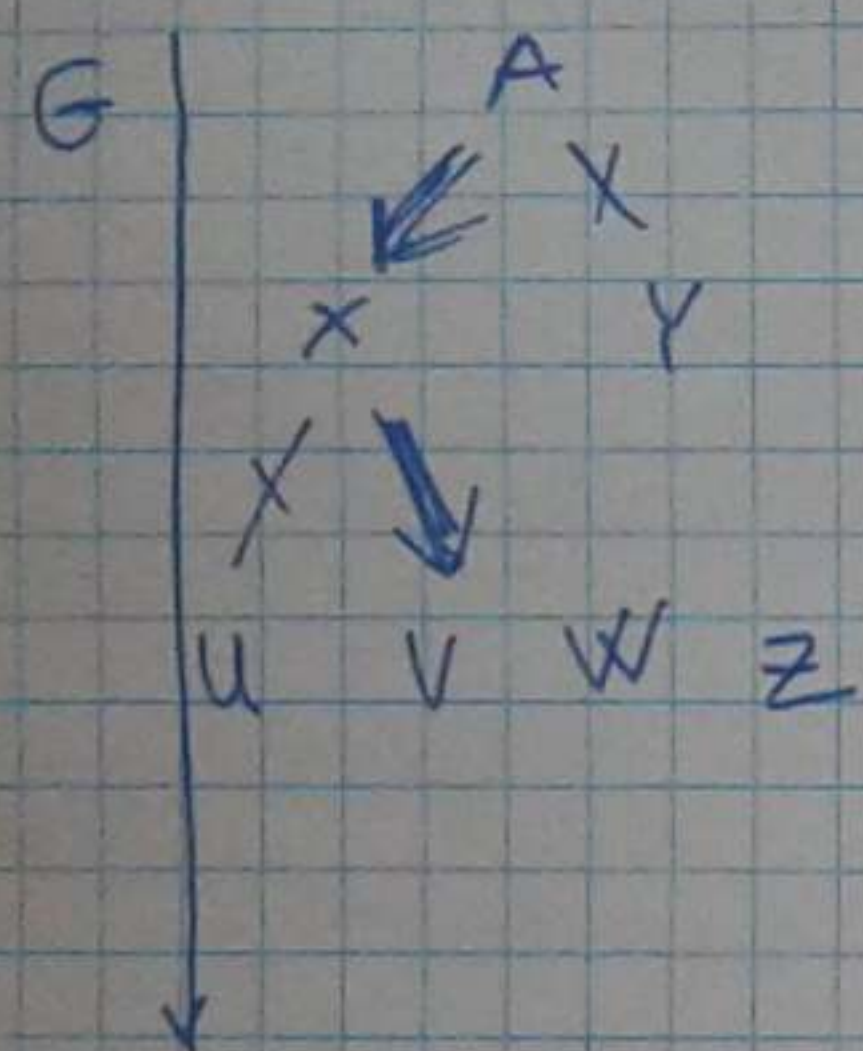
(egyetemes gázállandó = Boltzmann állandó)

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[B]}{[A]} \quad \rightarrow \text{szabadenergia}$$

$$\frac{[B]}{[A]} = K_e \quad \Delta G = 0 \rightarrow \text{egyensúly}$$

$$\frac{[B]}{[A]} < K_e \quad \Delta G < 0 \rightarrow A \rightarrow B$$

$$\frac{[B]}{[A]} > K_e \quad \Delta G > 0 \rightarrow B \rightarrow A$$

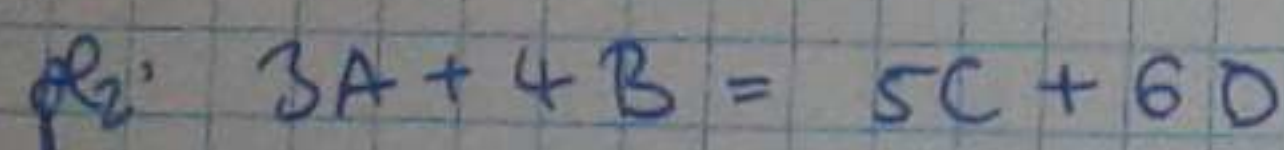
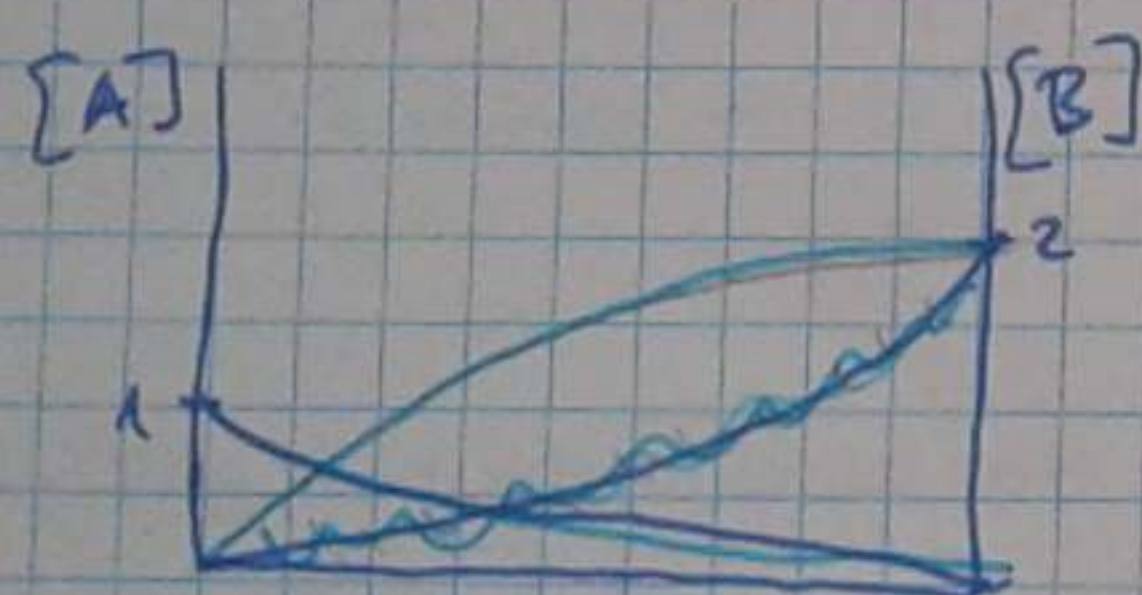


katalizátorokkal
befolyásolhatóan (↓)

Reakciósebesség

reakciósebesség p_1 : $A \rightarrow 2B$

$$v_1 = -\frac{d[A]}{dt} \quad v_2 = \frac{d[B]}{dt}$$



$$-\frac{d[A]}{3dt} = -\frac{d[B]}{4dt} = \frac{d[C]}{5dt} = \frac{d[D]}{6dt}$$

- ! - előjel
- konc. időbeli deriváltja
- stöchiometrikai áll. reciproka

Reakcióegyenlet

matematikai képlet

$$f(c_1, c_2, c_3, \dots, c_n)$$

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k \cdot [A]^m$$

↓
sebesség
áll

↓
a reakció
rendje

elsőrendű reakció: nem nitrátos utókezelés
(pl. bomlás)

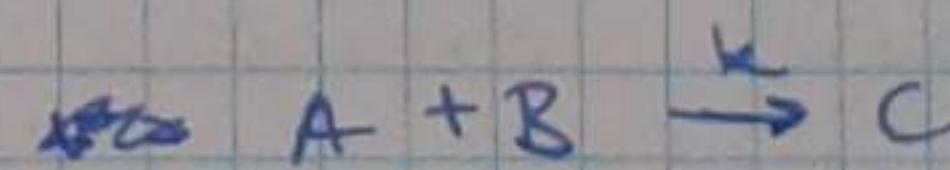
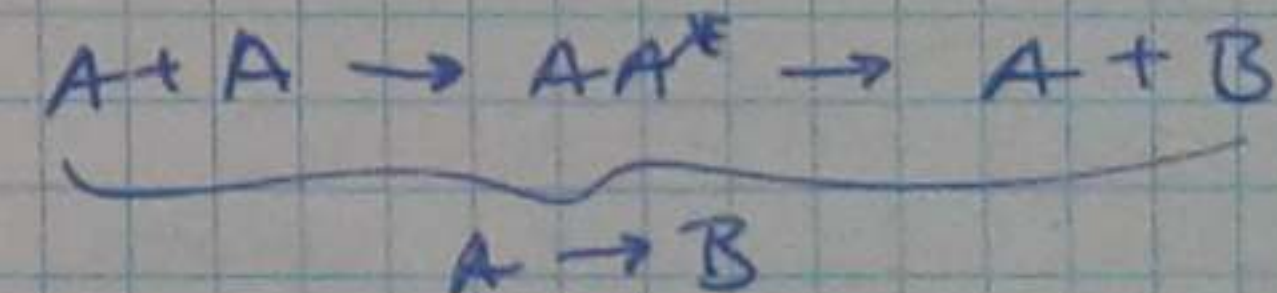
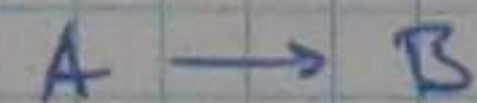
másod — — — két nitrátos utókezelés
nitrátos

harmad — — — három — — —
(ez leginkább csak elméleti)

k. mindig kísérlet eredménye

Egy komplex reakció rendje nem feltétlenül
egyenlő a stöchiometriával!

$$v = k \cdot [A]^m \cdot [B]^n \quad \text{ez lehet:}$$



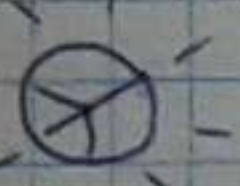
$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k \cdot [A]^2 [B] \quad \left\{ \begin{array}{l} A\text{-ben másodrendű} \\ B\text{-ben elsőrendű} \\ \text{együttesen harmadrendű} \end{array} \right.$$

k értéke?

pl $k = -\frac{1}{[A]^2[B]} \cdot \frac{d[A]}{dt} = \frac{M}{M^2 M \text{ sec}} = M^{-2} \text{ sec}^{-1}$

A k mértékegysége függ a reakció rendjétől.

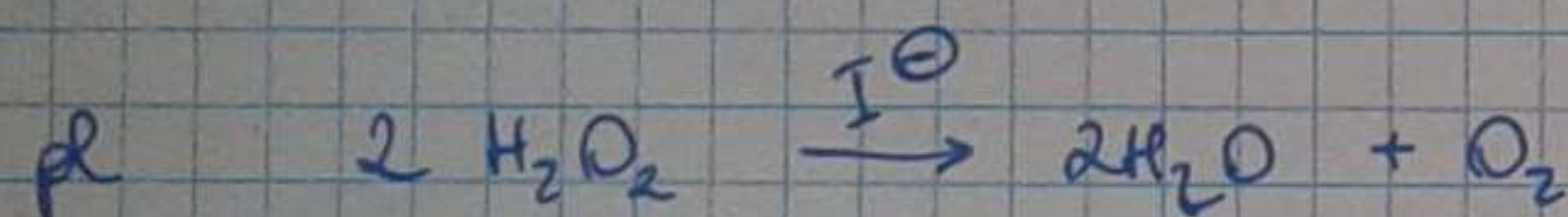
A reakció rendje lehet nem egész szám is.



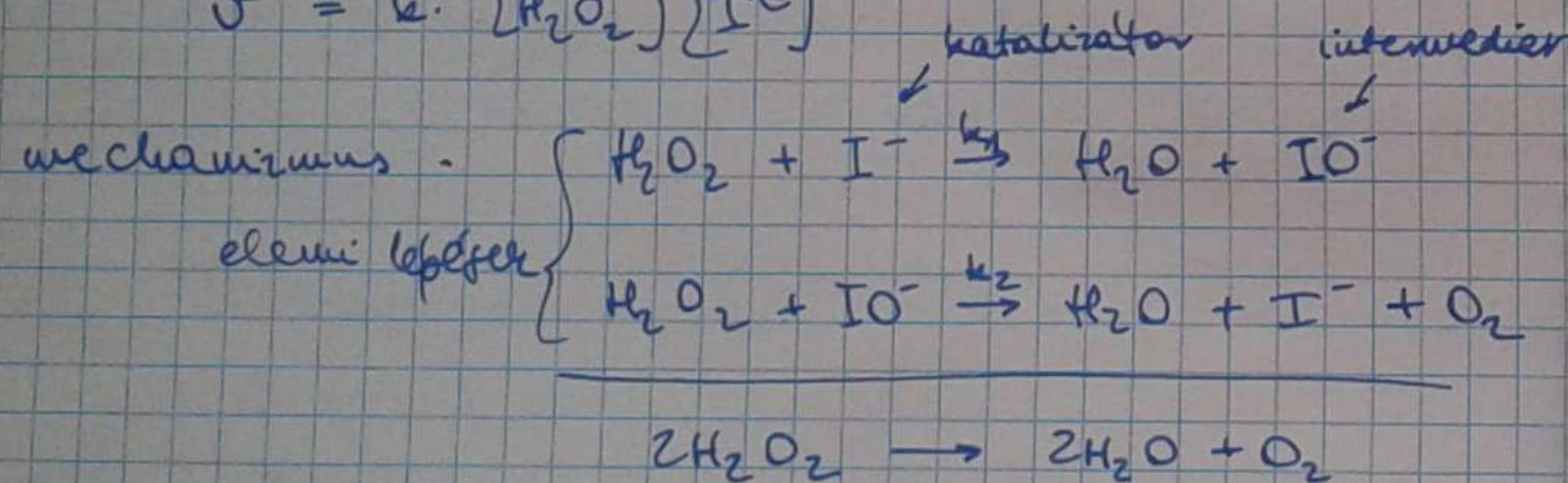
Reakciómechanizmus

elemi reakció: ami a részecske szintjén történik

a reakció mechanizmus: egy modell, amit elemi reakciókból veretünk le.



$v = k \cdot [\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-]$



elemi lépések

Elemi lépések esetében a mechanizmus levezethető a sztöchiometriából. Komplex reakciók esetében nem!

$v_1 = -\frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = k_1 [\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-]$

$v_2 = -\frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = k_2 [\text{H}_2\text{O}_2][\text{IO}^-]$

Komplex reakció esetén feltételezések:

* sebesség meghatározás:

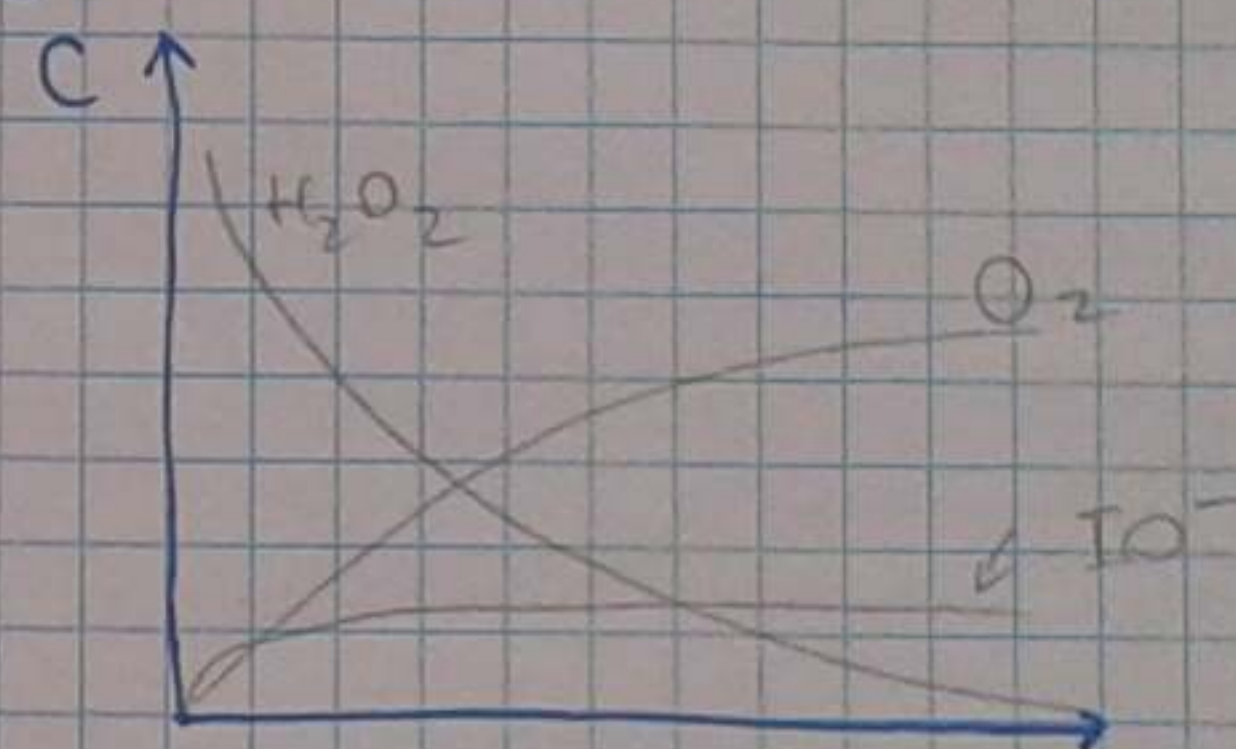
Ha $k_1 \ll k_2$

ekkor $v = v_1$ (mert a 2. lépésben kell az 1.-ben keletkező)

$v = v_1 = k_1 [\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-]$

$\frac{1}{2} \frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = -\frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = k_1 [\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-]$

steady-state feltételezés



$\frac{d[\text{IO}^-]}{dt} \approx 0 = k_1 [\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-] - k_2 [\text{H}_2\text{O}_2][\text{IO}^-]$

↑ képlet ↓ totális

$[\text{IO}^-] = \frac{k_1}{k_2} [\text{I}^-]$

molaritás (M) $c_B = \frac{n_B}{V_{\text{oldal}}}$

molaritás (m) $m_B = \frac{n_B}{m_{\text{oldal}}}$

molfrakció $x_B = \frac{n_B}{n_A + n_B}$

vegyéssűrűség $\rho = \frac{m_{\text{vegy}}}{V_0}$

állapotegyenlet:

$$f(V, p, N, T) = 0$$

$$pV = NkT$$

$$pV = nRT$$

(ideális gáz)

állapotfüggvény

Δf : csak a kezdeti és a végállapottól függ

$dp = 0$ izobar

$dV = 0$ izochor

$dT = 0$ izoterm

$\delta q = 0$ adiabatikus

nyílt, zárt, izolált $\rightarrow$ nyílt, zárt, hővezetést

U: belső energia

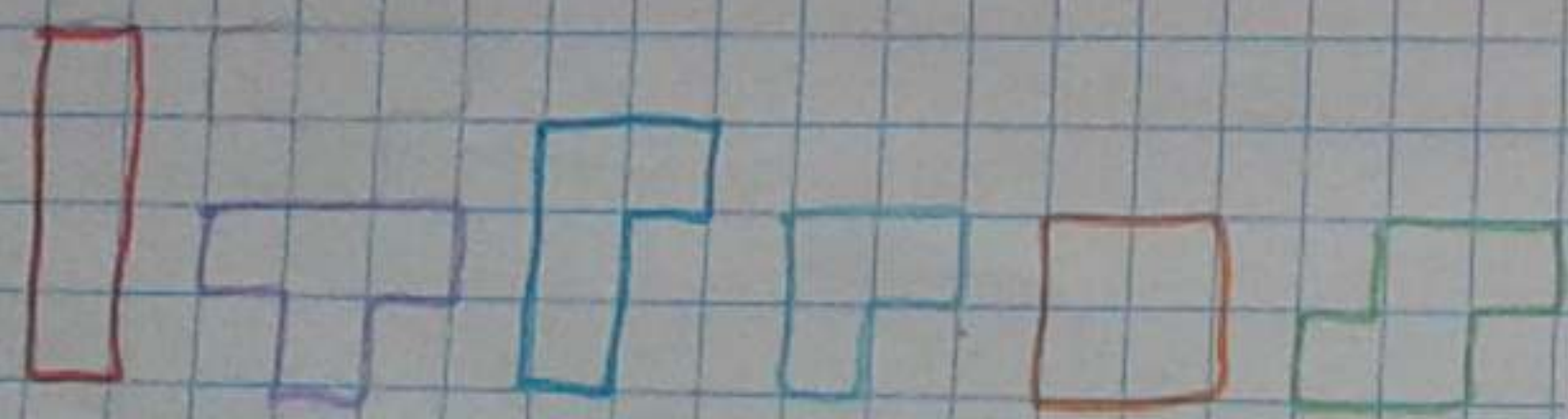
1. főtétel:

munka

$$dU = \delta q + \delta W = -p_{\text{külső}} dV + T ds$$

$$\delta W = -F dx = -p_{\text{külső}} A dx = -p_{\text{külső}} dV$$

Tetris dandó!



$$T_1 = T_2$$

$$T_2 < T_1$$

$$p_2 > p_1$$

2011.09.21 se

Reakciókinetika: folyamatok leírása

Termodinamika: egyensúlyi helyzeteket vizsgál

makroszkopikus jellemzők V, p, T , ami az anyag egészére jellemző

Reakciók körüli kft-k
kolligatív tulajdonság: értéke a részecskék számától függ
reakció rendezése meghatározható

$A + B \rightarrow C$ rendszer összefüggést ír fel az anyagok mennyiségéről, analízis során

$$v = k \cdot [A]^m [B]^n$$

↓
sebesség állandó $k(T, c)$

$$\log xy = \log x + \log y$$

$$\log x^a = a \log x$$

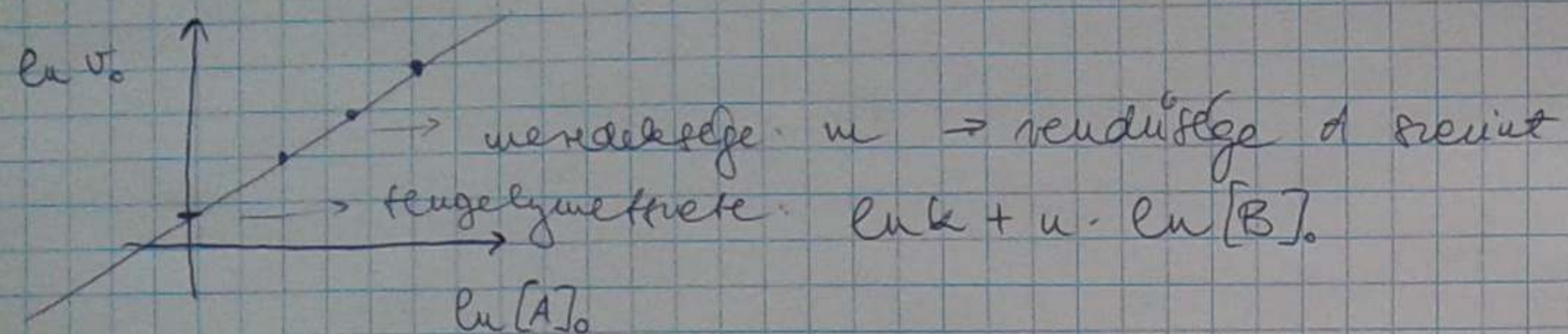
A sebesség "adatai" kísérleti úton meghatározhatók

Kísérlet	Koncentráció	$[A]_0$ (mM)	$[B]_0$ (mM)	v_0 (mM/min)
1.	1	1	5	0,001
2.	5	5	5	0,025
3.	10	10	5	0,100

↓
A-ra valószínűleg másodrendű

a reakció rendezése nem állapítható meg részecskére

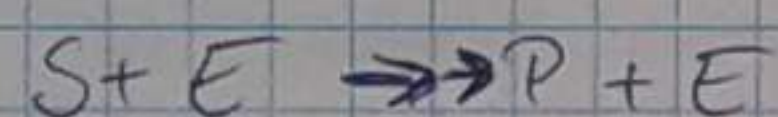
$$\ln v = \ln k + m \cdot \ln[A] + n \cdot \ln[B]$$



ugyanaz $[B]_0$ -re is felírható, így kapott
3 egyenletből m és n meghatározható

tehát 2 mérőszámmal $\rightarrow k, m, n$ meghatározható

$$v = \frac{k \cdot [E][S]}{K_m + [S]}$$



Michaelis-Menten egyenlet

K_m : Michaelis állandó

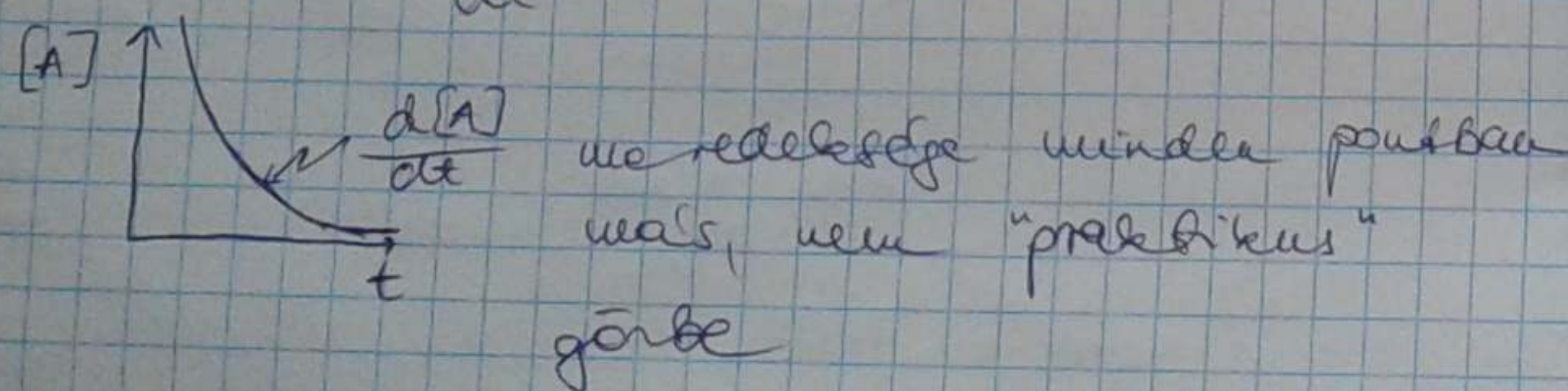
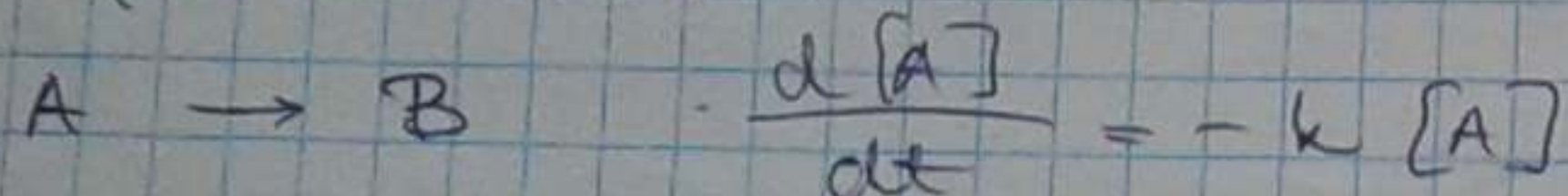
$K_m \gg [S] \rightarrow S$ -ben elsőrendű,
a nevező csak: K_m

$K_m \ll [S] \rightarrow S$ -ben nulladrendű,
a nevező csak $[S]$

reakciósebesség egyenlet integrálása

① Elsőrendű reakció:

olyan fű kell, ami mutatja a koncentrációt az
idő függvényében



$$\int_{A_0}^A \frac{d[A]}{[A]} = -k \int_0^t dt$$

$$\ln[A]_A - \ln[A]_{A_0} = -k \cdot t$$

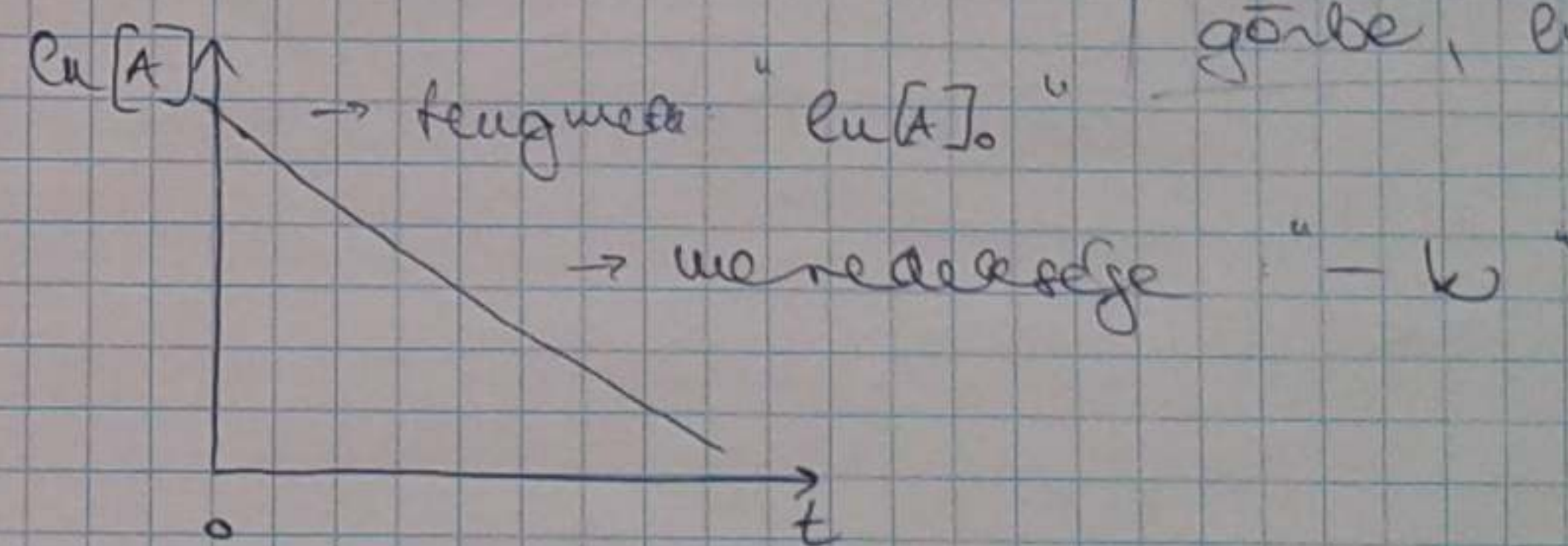
$$\ln[A] - \ln[A]_0 = -k \cdot t$$

$$\ln \frac{[A]}{[A]_0} = -kt$$

$$\frac{[A]}{[A]_0} = e^{-kt}$$

$$[A] = [A]_0 \cdot e^{-kt}$$

tehát exponenciális a
görbe, $\ln[A]$ egy egyenes
len!



Kémia

k (sec^{-1})

reakció állandó

$\tau = \frac{1}{k}$ (sec)

relaxációs idő

$\tau_{1/2}$ (sec)

felbontási idő

Fizika

λ

bolgató állandó

$T = \frac{1}{\lambda}$

élettido

$\tau_{1/2}$ (sec)

felbontási idő

Feladási idő

$$u = \frac{u_0}{2} \quad \tau_{1/2}$$

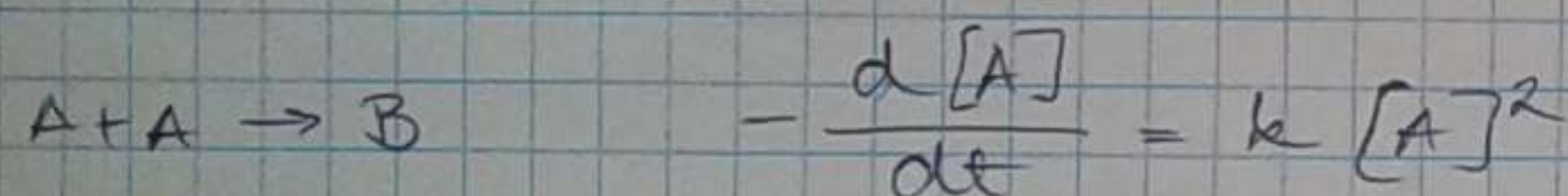
$$\text{ha } t = \tau_{1/2} \quad \frac{u_0}{2} = u_0 e^{-\tau_{1/2}/\tau}$$

$$\frac{1}{2} = e^{-\tau_{1/2}/\tau} \Rightarrow 2 = e^{\tau_{1/2}/\tau}$$

$$\ln 2 = 0,693 = \tau_{1/2}/\tau$$

$$\boxed{\tau_{1/2} = 0,693 \tau \quad | \quad \tau = \frac{1}{k} = \frac{1}{\lambda}}$$

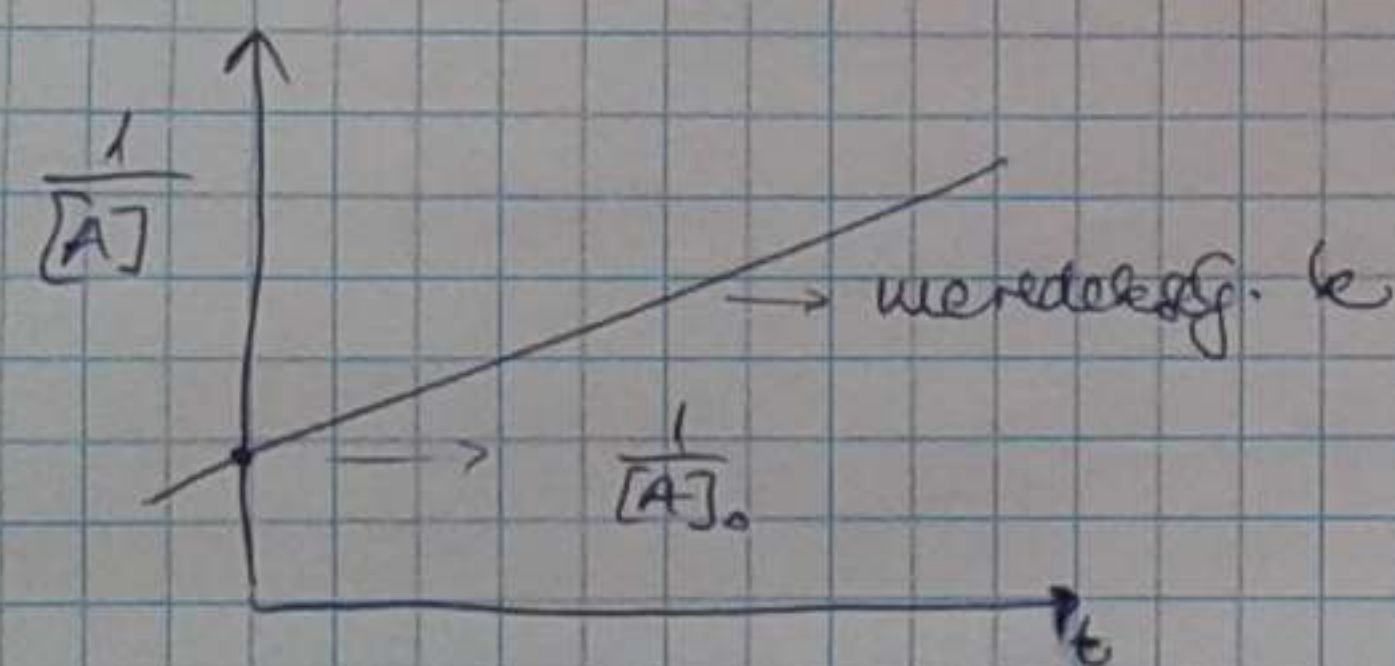
3. Másodrendű reakció



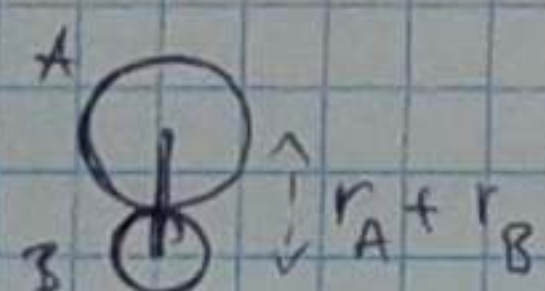
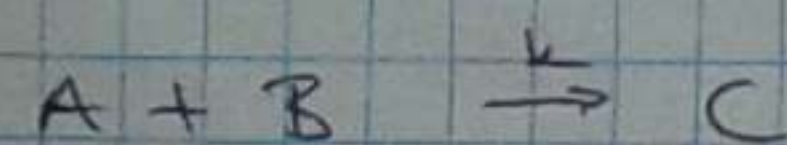
$$-\int \frac{d[A]}{[A]^2} = k \int dt$$

$$\left[\frac{1}{[A]} \right]_0^t = k[t]_0^t$$

$$\boxed{\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = kt}$$



Arrhenius 1889. reakciósebességi elmélet kidolgozása



ha ilyen találkoznak

aktív állapotba kerülnek, így vizsgálhatjuk az ütközések számát

$$Z = \pi (r_A + r_B)^2 v_A [B][A]$$

↓

az ütközések száma / ~~ütközések~~ hogy függ a v a hőmérséklettől?

$$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} k_B T$$

↓
a v függ az

ütközések számától

↓
az ütközések száma függ a hőmérséklettől

$$v = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$$

$$v_{\text{relatív}} = \sqrt{\frac{8}{\pi} \frac{k_B T}{\mu}}$$

$$\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (\text{redukált tömeg})$$

$$\boxed{Z = \pi (r_A + r_B)^2 \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu}} [A][B]}$$

szorzó, eredményes ütközések

eredményes ütközések valószínűsége: P

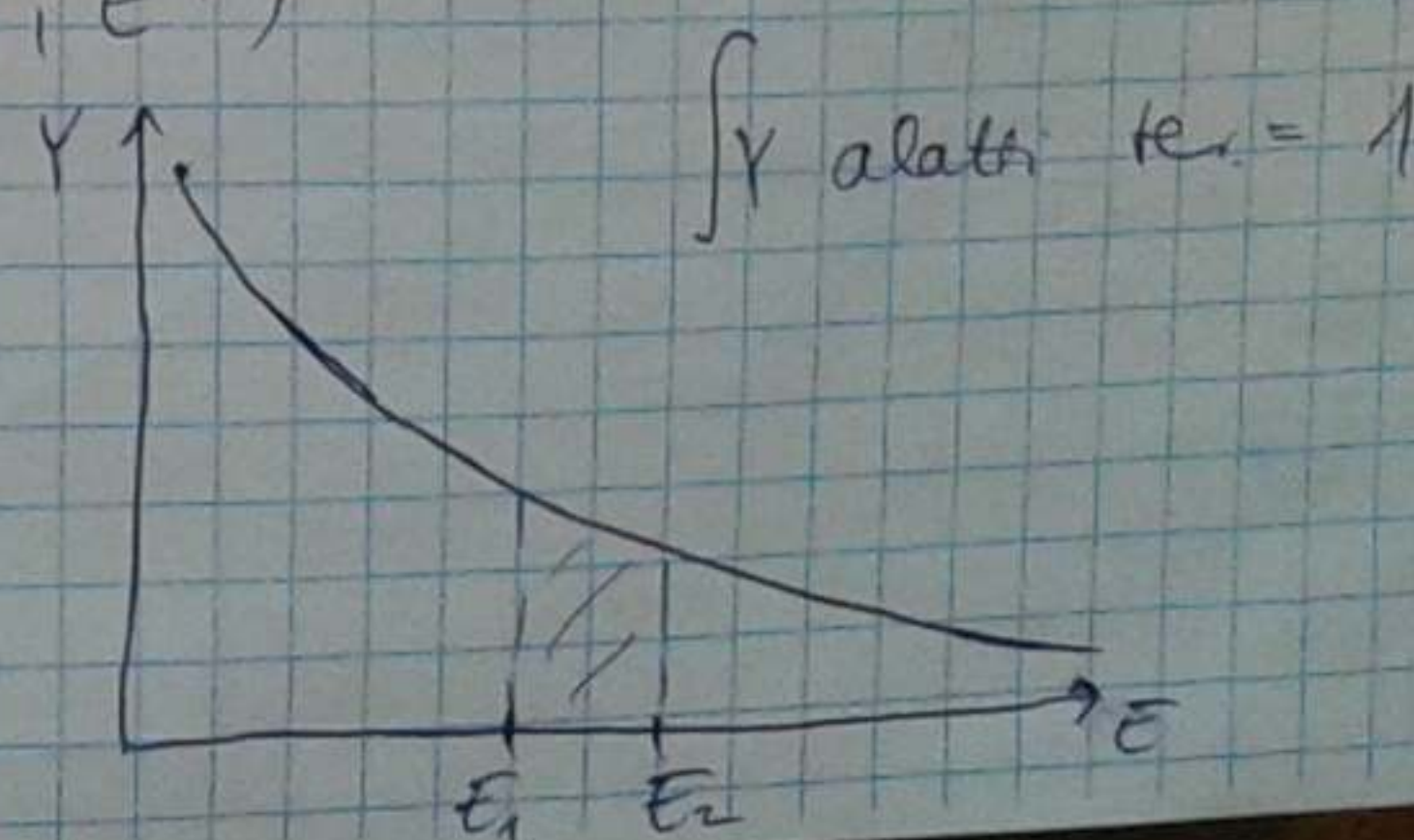
$$0 < P < 1$$

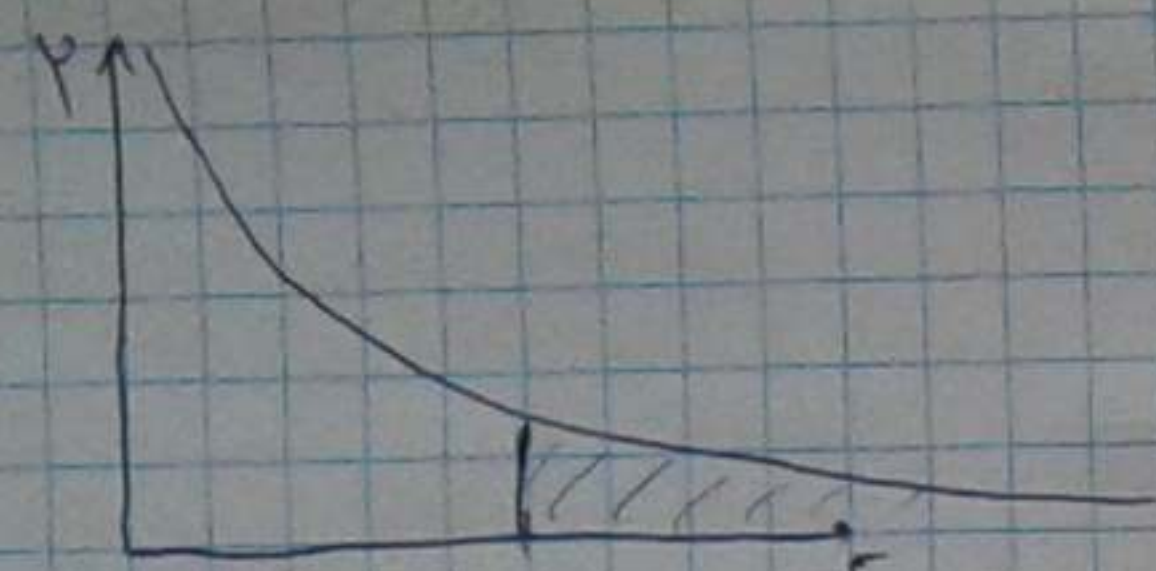
ütközés + megfelelő orientáció + aktiválási energia
(ezek bellenek a reakció lejátszódásához)

→ aktív komplex

Aktiválási energia (E, E^*)

Maxwell eloszlás





Tételek = A. első egyenlő.

$$\int_{E_1}^{E_2} Y dE = (u|E_2) - (u|E_1)$$

Maxwell $Y = \frac{1}{RT} \cdot e^{-E/RT}$

maximális effektus.

$$\int_{E^*}^{E_{\infty}} Y dE = \int_{E^*}^{E_{\infty}} \frac{1}{RT} e^{-E/RT} dE =$$

$$= \left[-e^{-E/RT} \right]_{E^*}^{E_{\infty}} = e^{-E^*/RT}$$

$e^{-\infty} = 0$

$$= e^{-E^*/RT}$$

A. Arrhenius all.

$$v = \underbrace{\pi \cdot (r_A + r_B)^2 \cdot \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu}} \cdot P}_{(k)} \cdot e^{-E^*/RT} [A] [B]$$

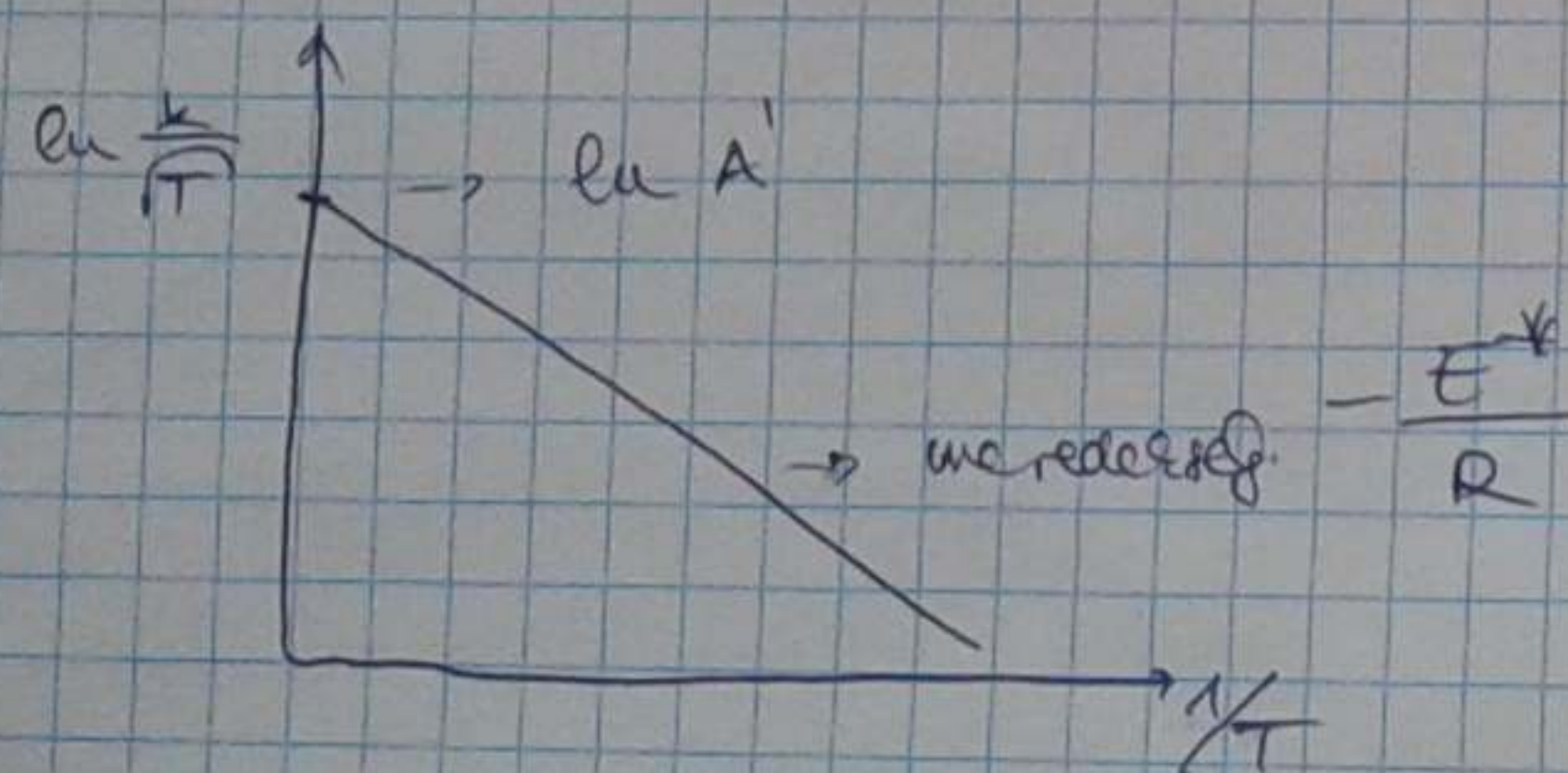
$v = k [A] [B]$ → tapasztalati egyenlet

Ebből kinetikus feladat. meghatározni meg E^* -t, ha adott. mérőszámok T és k (adott hőmérsékleten mért értékek k -t)

$$A' = \pi (r_A + r_B)^2 \sqrt{\frac{8k_B}{\pi \mu}} \cdot P$$

$$A = A' \cdot \sqrt{T}$$

$$\frac{k}{\sqrt{T}} = A' e^{-E^*/RT}$$



Gyakorlat

entropia változás.

$$dS = \frac{\delta q}{T}$$

U: belső energia → megváltoztatás.

S: entropia

munka végzés + hő

$$dU = \delta w + \delta q$$

(első differenciál)

(termodinamikai folyamatok)

izochor folyamat a V változatlan (hőforrás)

$$\delta w = \delta w_v + \delta w_e$$

hőforrás

egyes munkavégzés

munka a V-n változtatás

$$\delta w_v = -p dV$$

$$\delta w_e = 0$$

$$\delta w = -p dV + \delta q$$

$$dU = \delta q$$

izobar folyamat

$$dp = 0$$

$$H = U + pV$$

entalpia

$$dH = dU + p dV + V dp =$$

$$= -p dV + p dV + V dp + \delta q$$

$$dH = \delta q$$

1. főtétel

$$\begin{array}{c|c} T_1 & S_1 \\ \hline T_2 & S_2 \end{array} \quad \begin{array}{c} (a \text{ és } b \text{ ad } b) \\ T_2 > T_1 \end{array}$$

$$dS_1 = \frac{\delta q_1}{T_1} < 0 \quad dS_2 = \frac{\delta q_2}{T_2} > 0 = -\frac{\delta q_1}{T_2}$$

$$dS_1 < 0 \quad dS_2 > 0$$

$$\delta q_1 = -\delta q_2$$

$$|dS_2| < |dS_1|$$

$$dS_t = dS_1 + dS_2 < 0$$

$$dS_t \geq 0$$

$$dS \geq \frac{\delta q}{T} \quad \delta q \leq T dS$$

$$dU = \delta w + \delta q = -pdV + \delta q$$

$$dU \leq -pdV + T dS \quad dU=0, dv=0$$

$$dS \geq \frac{1}{T} dU - \frac{P}{T} dv = 0$$

entropia maximuma

hidrogén réte E nem állandó, de a T és p igen

szabadenergia (F)

$$F = U - TS$$

$$dF = dU - T dS - S dT$$

$$\underbrace{\delta q}_{\delta w}$$

$$\text{izoterm: } dF \leq -pdV + SdT = 0$$

szabadenergia minimuma

szabadentalpia / Gibbs-féle szabadenergia

$$G = H - TS = U + pV - TS$$

$$dG \leq -pdV + pdV + Vdp - TdS + TdS - SdT = 0$$

szabadentalpia minimuma

mi van, ha $\delta w_e \neq 0$?

$$dU = \delta w_v + \delta w_e + \delta q$$

$$\text{izoterm, izobár} \quad dG \leq Vdp - SdT + \delta w_e = 0 + \delta w_e$$

$$dG \leq \delta w_e$$

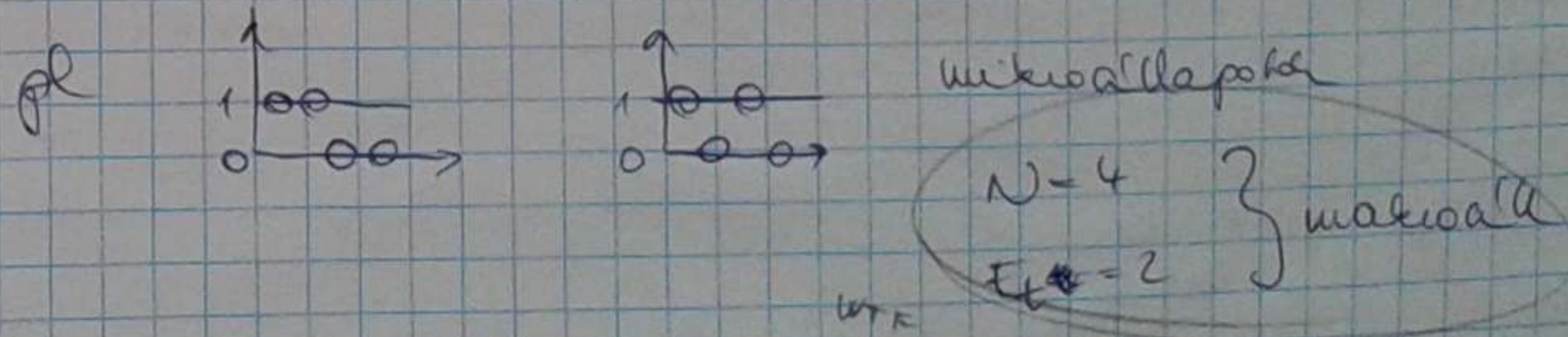
reakció: $\rightarrow$ egy folyamat során
végeredmény max nem befogati
minimális

reakció $\rightarrow dG$ $\rightarrow$ munka végzés
(szabadentalpia felhasználása)

makroállapot: klasszikus termodinamika által
mértékelt paraméterei egy makroállapot
hoz-nak $(p, U, T, \dots)$

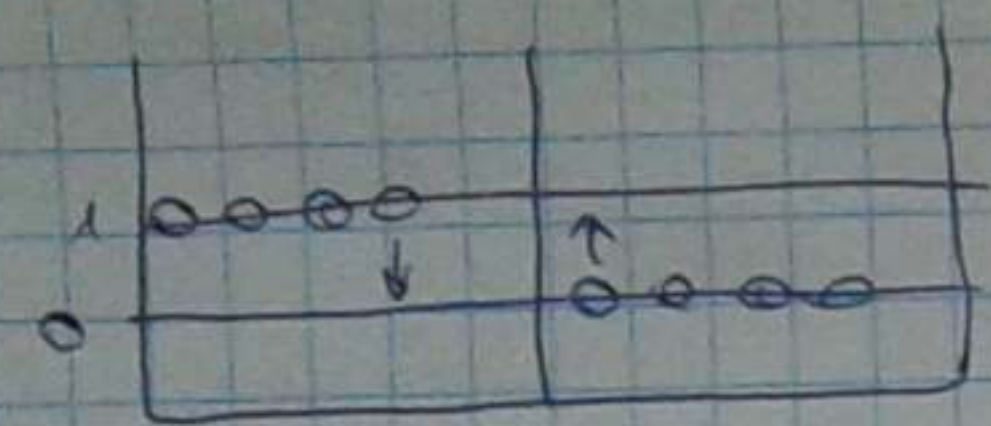
mikroállapot: mikroszkopikus részecskék milyen tul.
jellemzői elrendeződése

(ugyanazt a makro- + többféle
mikro is előállíthatja)



$$S = k \cdot \ln \Omega \rightarrow \text{makroállapot}$$

$\downarrow$
mikroállapotok száma



$$N_1 = 4$$

$$N_2 = 4$$

$$\bar{E}_z = 4$$

$$\binom{4}{4} \binom{4}{0} = 1$$

$$\binom{4}{3} \binom{4}{1} = 16$$

$$\binom{4}{2} \binom{4}{2} = 36$$

ha a mikróállapotok egyforma

valószínűségűek akkor abból a valószínűségi

van több (az valószínűségi), amint

több mikróállapot van.

→ egyenlőség: ezt valószínűségi meg a

legnagyobb mikróállapot

az állapotsűrűség

2011. 09. 28. sz.

Abszolút reakciósebesség elmélet

Eyring

reakció profil

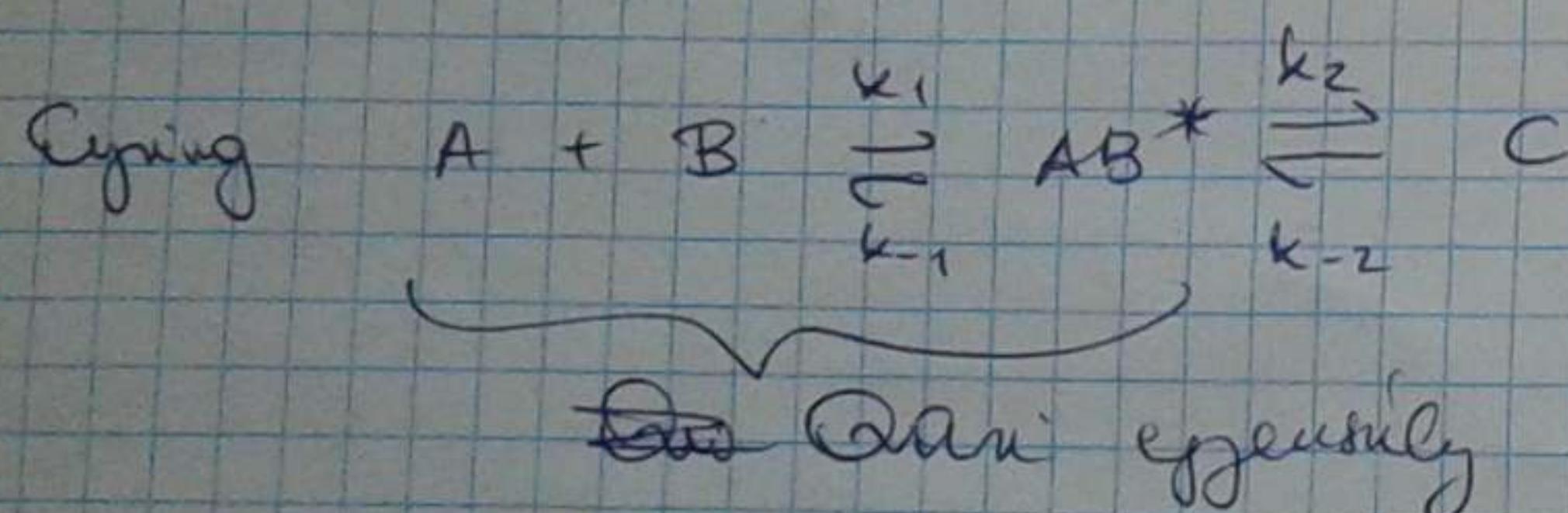
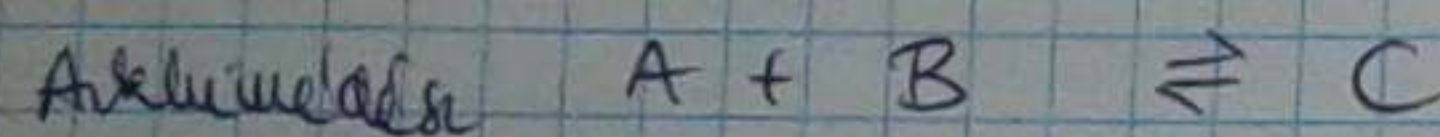
Van't Hoff ábrázolás

Kelvin potenciál

Additivitás szabály

Gibbs - Duhem egyenlet

Aktivitás



$$K_{eq}^* = \frac{[AB^*]}{[A][B]}$$

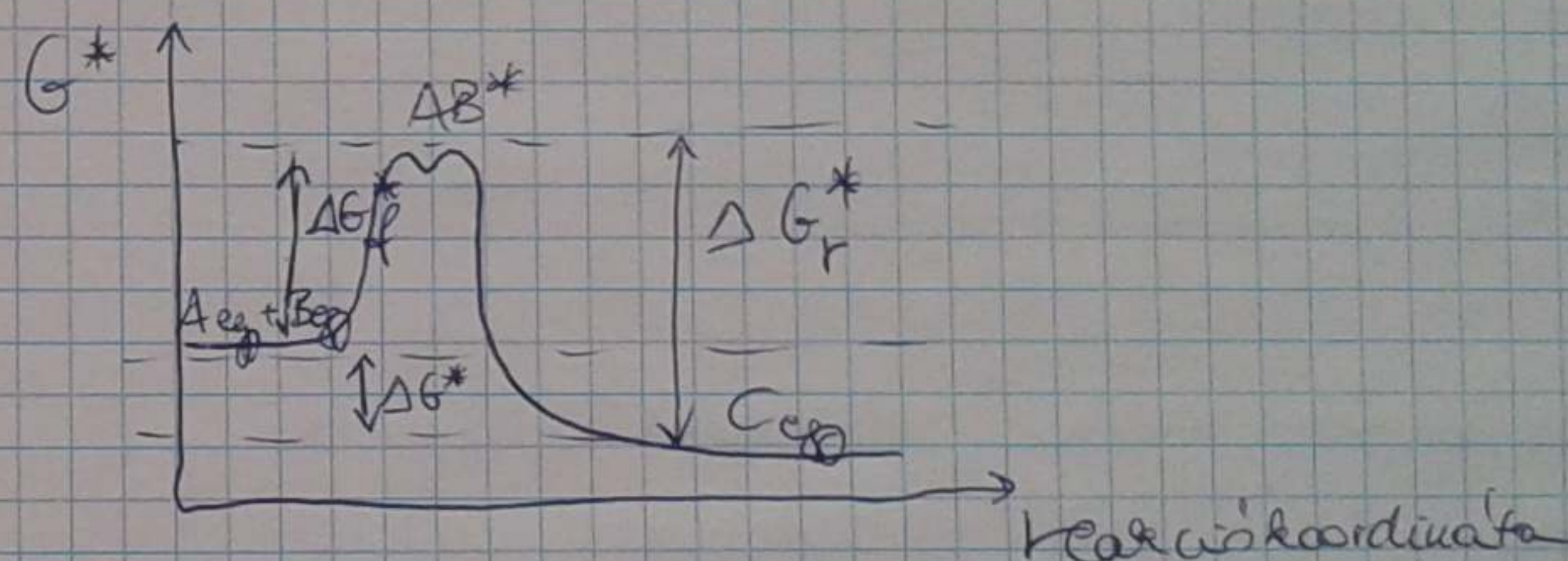
$$[AB^*]^* = K_{eq} [A][B]$$

$$\Delta G^*$$

$$\Delta G_p^* = -RT \ln K_{eq}^*$$

$$\frac{[AB^*]_{eq}}{[A]_{eq} [B]_{eq}} = e^{-\Delta G_p^*/RT} \rightarrow$$

$$[AB^*]_{eq} = [A]_{eq} [B]_{eq} \cdot e^{-\Delta G_p^*/RT}$$



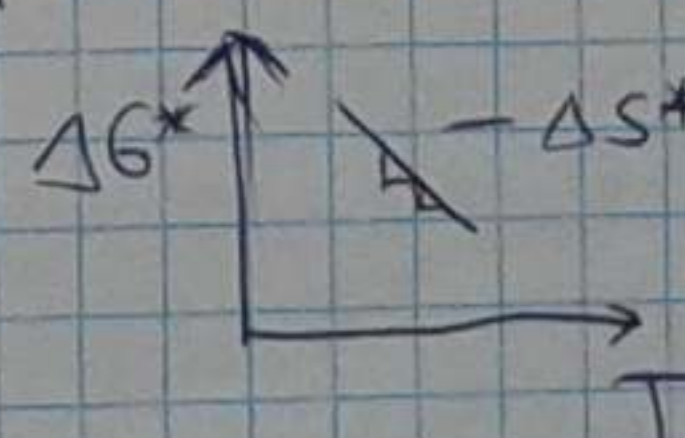
$$\Delta G^\circ = \Delta G_p^* - \Delta G_r^*$$

$$K_{eq}^* = e^{-(\Delta G_p^* - \Delta G_r^*)/RT}$$

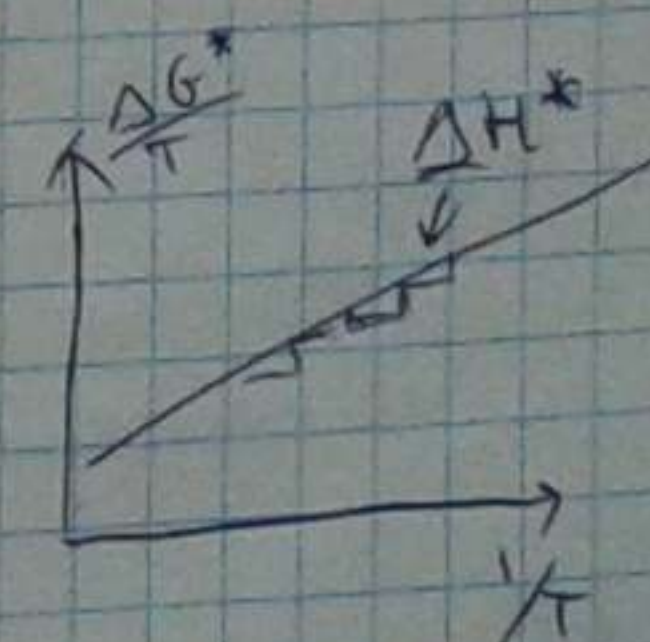
$$\Delta G^\circ = \Delta H^* - T \Delta S^*$$

(diszperzió energia → entalpia)

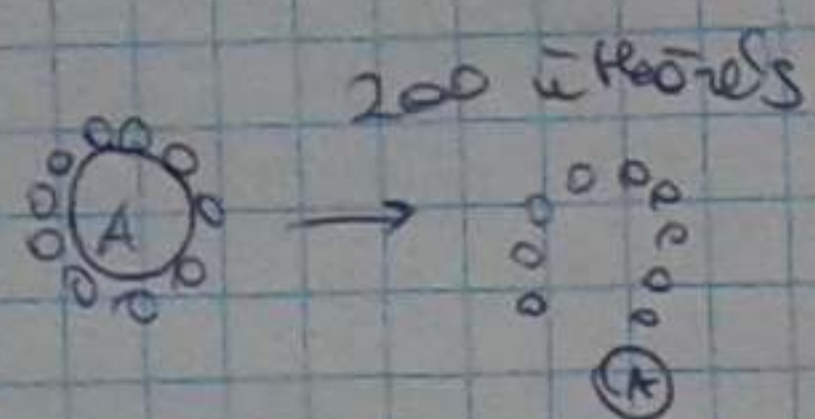
$$\frac{\partial(\Delta G^*)}{\partial T} = 0 - \Delta S^*$$



$$\frac{\Delta G^*/T}{\partial(1/T)} = \Delta H^*$$



Oldalke termodinamikája



$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

Gibbs felle szabadenergia $\rightarrow$ nem mérhető, csak ΔG mérhető!

~~szabad~~

$$\Delta G = G_{\text{vég}} - G_{\text{kezdő}}$$

→ mérhető
→ standard
 G_{298}° , 1 atm
↓
1 atm nyomás

Tiszta elemek esetében, standard állapotban a rendszer Gibbs felle szabadenergiaja 0.

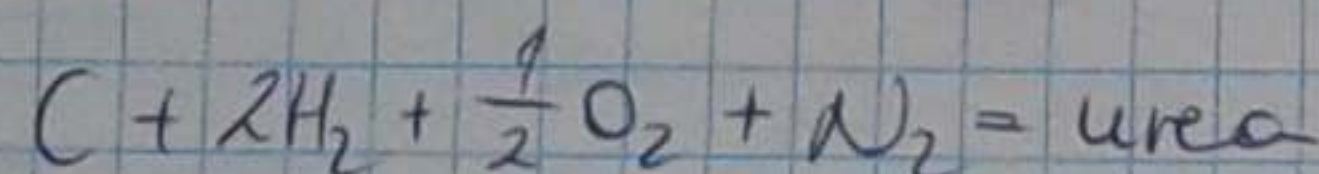
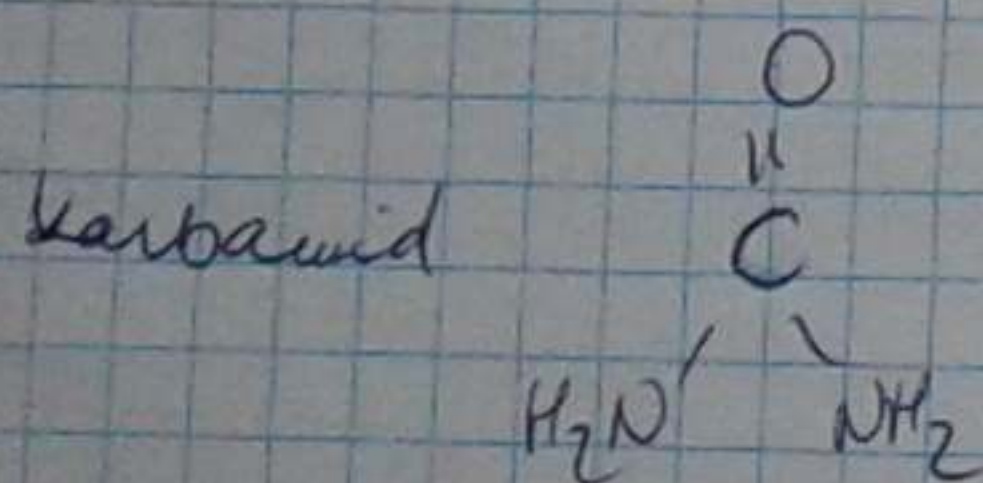
$$\bar{G}_{298}^{\circ} \text{H}_2(\text{g}) = 0$$

$$\bar{G}_{298}^{\circ} \text{O}_2(\text{g}) = 0$$

$$\bar{G}_{298}^{\circ} \text{C}(\text{grafit}) = 0$$

$$\Delta G_{\text{kepződés}} \text{H}_2\text{O}(\text{l}) = \bar{G}_{298}^{\circ} \text{H}_2\text{O}(\text{l}) -$$

$$- \bar{G}_{298}^{\circ} \text{H}_2(\text{g}) - \bar{G}_{298}^{\circ} \text{O}_2(\text{g}) = -56,69 \text{ kcal/mol}$$



$$\bar{G}_{298}^{\circ} \text{urea}(\text{s}) = -47,12 \text{ kcal/mol}$$

urea oldat G

$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial n_1} \right)_{T, P, n_2} \cdot dn_1 + \left(\frac{\partial G}{\partial n_2} \right)_{T, P, n_1} \cdot dn_2$$

↑
mórház
↑
mórház

$$\mu_1 = \left(\frac{\partial G}{\partial n_1} \right)_{T, P, n_2}$$

$$\mu_2 = \left(\frac{\partial G}{\partial n_2} \right)_{T, P, n_1}$$

↓
a víz kémiai potenciálja

↓
az urea kém. potenciálja

↓
szabadenergia jellegű mennyiség

termodinamika $\rightarrow$ extenzív mennyiség (n, V)
↓
intenzív menny. (T, P)

parciális fajlagos menny.

pl. víz + alkohol összeöntésekor
mivel a két fázisban
azaz összeöntése

$$dG = \mu_1 dn_1 + \mu_2 dn_2$$

Additívitás szabály

$$dG = \mu_1 dn_1 + \mu_2 dn_2$$

$$dG' = \mu_1' dn_1' + \mu_2' dn_2'$$

$$G = \mu_1 n_1 + \mu_2 n_2$$

Additívalis

$$dG = \mu_1 du_1 + \mu_2 du_2 + u_1 d\mu_1 + u_2 d\mu_2$$

$$dG = \mu_1 du_1 + \mu_2 du_2$$

$$0 = \mu_1 du_1 + u_2 d\mu_2$$

Gibbs - Duhem egyenlet

$$d\mu_2 = - \left(\frac{u_1}{u_2} \right) d\mu_1$$

$$\int_{\mu_2^0}^{\mu_2} d\mu_2 = - \int \frac{u_1}{u_2} d\mu_1 \Rightarrow \mu_2 - \mu_2^0 = - \int \frac{u_1}{u_2} d\mu_1$$

μ_2^0 = integrálási állandó.

$$\mu_1 = \mu_1^0 + RT \ln x_1 \quad \text{Ez az az } x_1 = \text{víz molfrakciója}$$

$$\frac{d\mu_1}{dx_1} = \frac{d\mu_1^0}{dx_1} + RT \ln \frac{x_1}{dx_1}$$

0

$$\textcircled{1} \left| \frac{d\mu_1}{dx_1} = RT \frac{1}{x_1} \right|$$

$$x_1 = \frac{u_1}{u_1 + u_2}$$

$$x_2 = \frac{u_2}{u_1 + u_2}$$

$$\Rightarrow \textcircled{2} \left| \frac{u_1}{u_2} = \frac{x_1}{x_2} \right|$$

$$x_1 + x_2 = 1$$

$$dx_1 + dx_2 = 0 \Rightarrow \textcircled{3} \left| dx_1 = -dx_2 \right|$$

123 $\rightarrow$

$$\mu_2 = \mu_2^0 - RT \int \frac{x_1}{x_2} \frac{dx_1}{x_1}$$

$$\mu_2 = \mu_2^0 - RT \int \frac{dx_1}{x_2}$$

$$\mu_2 = \mu_2^0 + RT \int \frac{dx_2}{x_2}$$

$$\boxed{\mu_2 = \mu_2^0 + RT \ln x_2}$$

Ez az az $x_1 \approx 0$

$$\boxed{\mu_1 = \mu_1^0 + RT \ln x_1}$$

Gyak

① Előrendű τ_x , relaxációs idő (τ ami alatt a reakciók kezdési C-a e-ad referenciaérték)

4 RC

$\Rightarrow$ sebességi egyenlet feltevése idő?

$$\tau = 4 \text{ sec} \quad A = A_0 e^{-kt}$$

$$\frac{A_0}{e} = A_0 e^{-kt}$$

$$\ln e = k \cdot 4$$

$$1 = k \cdot 4$$

$$k = \frac{1}{4} \text{ sec}^{-1}$$

$$\frac{A_0}{2} = A_0 e^{-k \tau_{1/2}}$$

$$\ln 2 = k \cdot \tau_{1/2}$$

$$\tau_{1/2} = 4 \ln 2 = 2,77 \text{ sec}$$

② $A \rightleftharpoons B$ egyensúlyi rx standard szabadenergiája: (ΔG°)
 -36 kJ/mol

a) mekkora az egyensúlyi áll. 25°C -on? (298 K)

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[B]}{[A]}$$

$$0 = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[B]_{\text{eq}}}{[A]_{\text{eq}}} = \Delta G^\circ + RT \ln K$$

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K$$

$$R = 8,314 \cdot 10^{-3} \text{ kJ/mol/K}$$

$$K = 2,04 \cdot 10^6$$

b) ha A c-ja = B c-ja

$\Delta G = ?$, melyik irányba megy spontán?

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[B]}{[A]}$$

1 mol $[B] = [A]$

$$\Delta G = \Delta G^\circ = -36 \text{ kJ/mol}$$

tehát $A \rightarrow B$ (egyensúlyban $[B] \gg [A]$
 K pozitív, leállításra van szükség van
 egyensúlyban)

③ Hatalozza meg grafikonon a kinetikai paramétereket (rendűség, sebességi konstans), így fel a sebességi egyenletet $A \rightarrow B$ reakcióra a megadott kísérleti értékek alapján

$\ln[A]_0$	$[A]_0$ (mM)	v_0 ($\frac{\text{mM}}{\text{sec}}$)	$\ln v_0$	$M = \frac{\ln v_0}{\ln[A]_0}$ *
1,609	5	1,7	0,53	
2,302	10	8,4	2,128	
2,708	15	21,0	3,044	

$$\ln v_0 = \ln k + n \ln [A]_0$$

$$(y = b + ax)$$

$$\text{mó. } n = 2,27$$

$$\ln k = -3,1$$

$$k = 0,04 \text{ sec}^{-1} \text{ mM}^{-1,27}$$

$$v_0 = k \cdot [A]_0^{2,27}$$

$$\frac{M}{\text{sec}} = k \cdot M^{2,27}$$

$$\frac{1}{\text{sec} \cdot M^{1,27}} = k$$

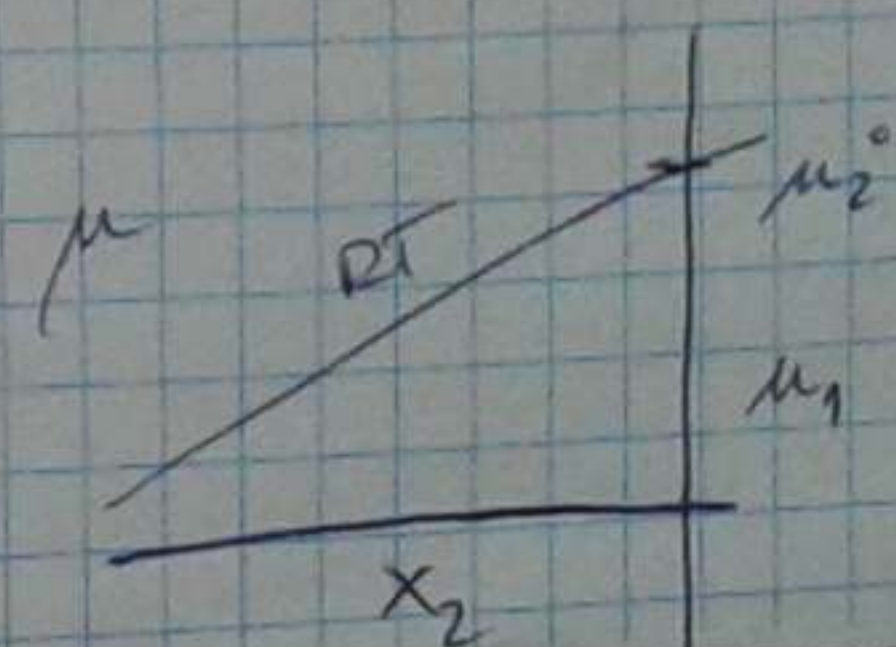
2011.10.05. re

Kémiai potenciál aktivitás a
 aktivitási koefficiens
 Osmótisugár

$$\mu_1 = \mu_1^\circ + RT \ln x_1$$

Daant fu,
 hig oldatok férénye

$$\mu_2 = \mu_2^\circ + RT \ln x_2$$



levegőben tartott víz ~~száraz~~ egyensúlyi telítettség
 a kémiai pot. ~~egyenlő~~ komponensekre ugyanakkor!

$$x_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} = \frac{\mu_2 / \ell}{\mu_1 / \ell + \mu_2 / \ell} = \frac{C_2}{C_1 + C_2}$$

C_1 a víz moláris koncentrációja

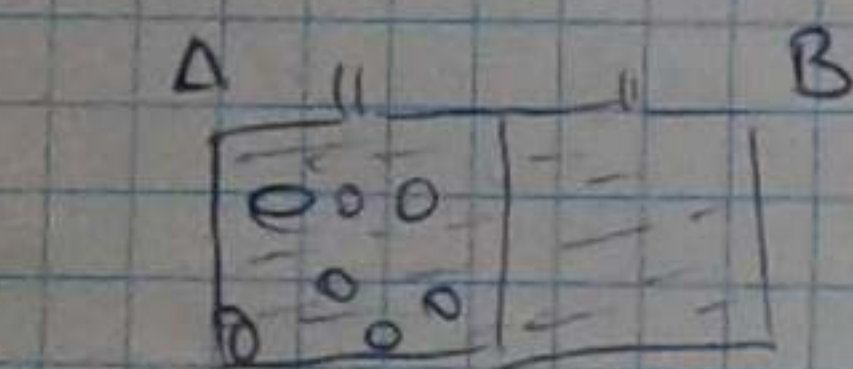
$$\ln a = \frac{\mu(\text{realis}) - \mu(\text{ideális})}{RT}$$

Def γ

$$a_2 = \gamma_2 C_2 \quad \gamma_2 = f(C_2)$$

$$\lim_{C \rightarrow 0} \gamma = 1 \quad [a] = \frac{\text{mol}}{\ell} = [C]$$

Ozmózis mérése

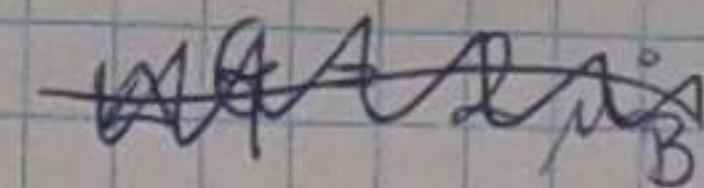
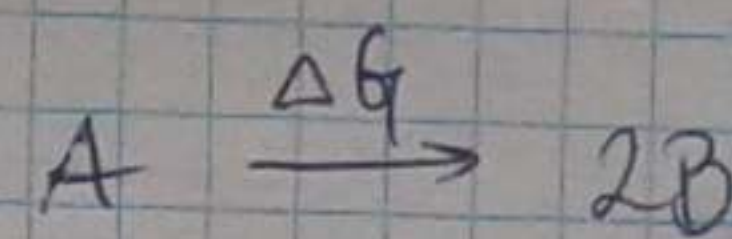


$H_2O + P$
 féláteresztő
 membrán

$$\mu_1^A = \mu_1^B \text{ egyensúly}$$

$$\pi \text{ (dyn/cm}^2\text{)} = h \text{ (cm)} \rho \text{ (g/cm}^3\text{)} \\ g \text{ (cm/sec}^2\text{)}$$

$$1 \text{ atm} = 1.01 \times 10^6 \text{ dyn/cm}^2$$



$$\mu_{1,A}(P + \bar{V}_1 x_{1,A}) = \mu_{1,A}^\circ(P + \bar{V}_1) + RT \ln \gamma_{1,A} x_{1,A}$$

$$\mu_{1,B}(P, x_{1,B}) = \mu_{1,B}^\circ + RT \ln \gamma_{1,B} x_{1,B}$$

$$\boxed{\mu_{1,A}^\circ(P + \bar{V}_1) + RT \ln \gamma_{1,A} x_{1,A} = \mu_{1,B}(P)}^*$$

Hogyan függ μ P -től?

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T,n} = V \quad \left(\frac{\partial G}{\partial n}\right)_{T,P} = \mu \left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right) =$$

$$= \left[\frac{\partial}{\partial P} \left(\frac{\partial G}{\partial n}\right)_{T,P}\right]_{T,n} = \left[\frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T,P}\right]_{T,P} = \left(\frac{\partial V}{\partial n}\right)_{T,P} =$$

$$= \bar{V}_1$$

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right) = \bar{V}$$

$$\frac{\partial \mu_i^\circ}{\partial P} = \bar{V}_i^\circ \Rightarrow \int_P^{P+\bar{V}_1} \partial \mu_i^\circ = \int_P^{P+\bar{V}_1} \bar{V}_i^\circ \partial P$$

$$\mu_i^\circ(P + \bar{V}_1) - \mu_i^\circ(P) =$$

$$\bar{V}_1^\circ \pi = RTx_2 - RT \ln \gamma_1 \quad \text{de } u_1 > u_2$$

$$\bar{V}_1^\circ \pi = RT \frac{u_2}{u_1} - RT \ln \gamma_1 \quad u_1 \bar{V}_1^\circ \approx V_1$$

$$\pi = \frac{RTu_2}{V} - \frac{RT \ln \gamma_1}{\bar{V}_1^\circ}$$

$$\pi = RTc_2 - \frac{RT \ln \gamma_1}{\bar{V}_1^\circ}$$

$$\left. \begin{array}{l} c_2: \text{mol/l} \\ w_2: \text{g/l} \\ M_2: \text{g/mol} \end{array} \right\} c_2 = \frac{w_2}{M_2}$$

$$\pi = \frac{RTw_2}{M_2} - \frac{RT}{\bar{V}_1^\circ} \ln \gamma_1$$

$$\text{mígaddig } \gamma_1 \approx 1 \Rightarrow \ln \gamma_1 \approx 0$$

$$\pi = \frac{RTw_2}{M_2}$$

$$\Rightarrow M_2 = \frac{RTw_2}{\pi}$$

$$\begin{array}{l} R = 0,08206 \frac{\text{bar} \cdot \text{m}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}} \\ T = 298 \text{ K} \\ \pi = 0,01 \text{ atm} \end{array}$$

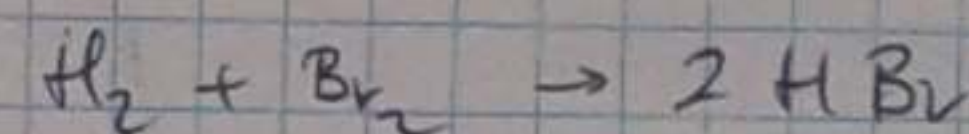
$$w_2 = 10 \text{ g/l}$$

$$M_2 \approx 25.000$$

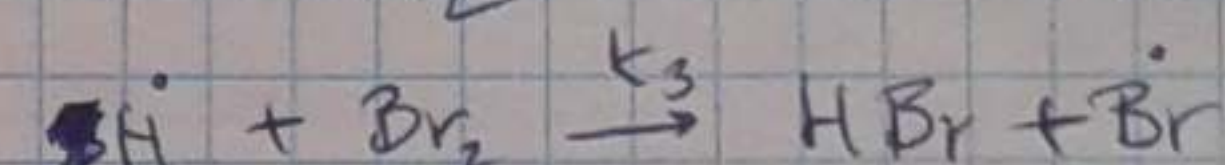
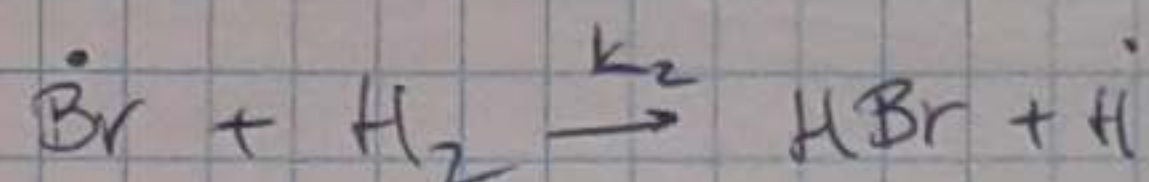
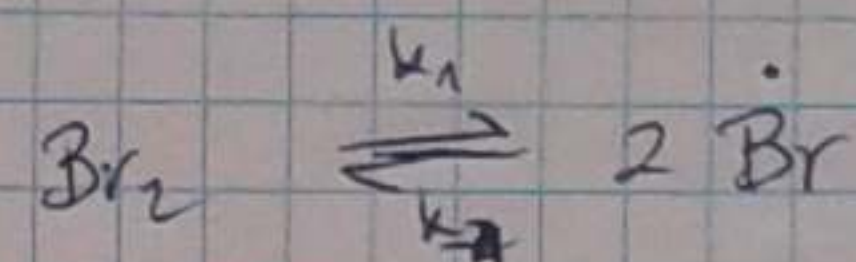
$$\boxed{\pi = c_2 RT}$$

Gyak

1) HBr képződése, brutto egyenlet



a mechanizmus



sebesség egyenlet, ha az első elemi rx egyensúlyi állapotot ér el, a második rx pedig sebességhatárokozó lépés

$$v_B = k_B [\text{H}_2]^n [\text{Br}_2]^m$$

$$v_B \approx v_2 = k_2 [\dot{\text{Br}}] [\text{H}_2] = k_2 k_1^{1/2} [\text{Br}_2]^{1/2} [\text{H}_2] =$$

$$k = \frac{[\dot{\text{Br}}]^2}{[\text{Br}_2]} = \frac{k_1}{k_{-1}} \quad \Rightarrow k_2 \left(\frac{k_1}{k_{-1}} \right)^{1/2} [\text{Br}_2]^{1/2} [\text{H}_2]$$

$$[\dot{\text{Br}}] = \sqrt{k [\text{Br}_2]}$$

$$v_1 = k_1 [\text{Br}_2]$$

$$v_2 = k_{-1} [\dot{\text{Br}}]^2$$

2) kémiai rx, sebesség 2x-es lenni ha $\Delta T: 10^\circ \text{C} \rightarrow 10^\circ \text{C}$
10x-es növekedéshez ? °C

$$\boxed{k = A \cdot e^{-E_a/RT}}$$

$$k_1 = A \cdot e^{-E_a/RT_1}$$

$$k_2 = A \cdot e^{-E_a/RT_2}$$

$$\begin{array}{l} T_1 = 283 \text{ K} \\ T_2 = 293 \text{ K} \end{array}$$

$$k_b = A e^{-E_A/RT}$$

$$k_b = 10 k_1 = 10 A e^{-E_A/RT_1}$$

$$T_b = 46^\circ\text{C} = 319\text{K}$$

$$e^{-E_A/RT_b} = 10 e^{-E_A/RT_1}$$

$$-\frac{E_A}{RT_b} = \ln 10 - \frac{E_A}{RT_1}$$

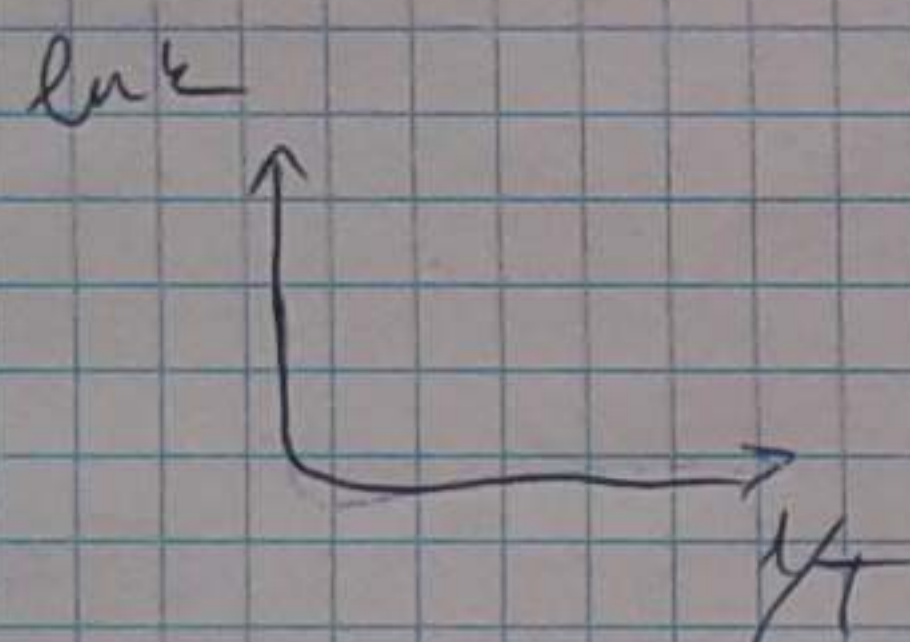
$$T_b = - \frac{E_A}{R \left(\ln 10 - \frac{E_A}{RT_1} \right)}$$

(2B)

$$k = A e^{-E_A/RT}$$

$$\ln k = \ln A - \frac{E_A}{R} \cdot \frac{1}{T}$$

meredőszög: $-\frac{E_A}{R}$



2011.10.19. Ne

Ozmózisnyomás

makromolekulák + ionok

oldatok termodinamikája

Donnan potenciál

Debye-Hückel effektus

ozmózisnyomás módszerrel pl. meghatározható az oldatban lévő részecskék száma

ozmózisnyomás

$$\pi = RT \frac{w_2}{M_2} + RT \ln \gamma$$

$$a = \gamma \cdot c \quad \left(\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \right)$$

aktivitás
(mol/c)

aktivitási
koefficiens

($\lim_{c \rightarrow 0} \gamma = 1$)
a m és az ideális gáz
viselkedésére

Taylor-sorfejtés: $\pi = RT \frac{w_2}{M_2} + RT (B_2 w_2^2 + B_3 w_2^3 + B_4 w_2^4)$

ellangáz-
hatások

$$\pi = RT \frac{w_2}{M_2} + RT B_2 w_2^2$$

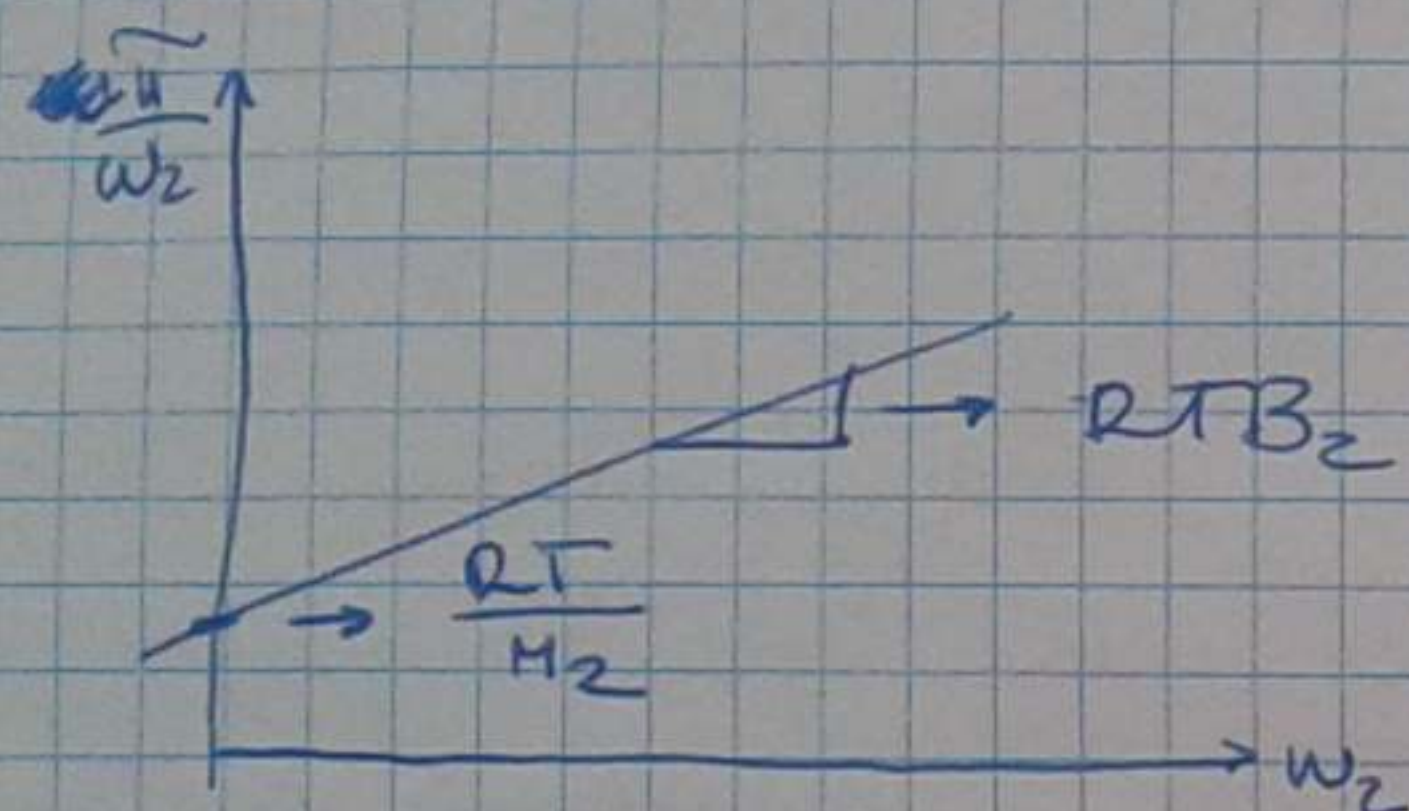
$\frac{1}{M_2}$: első víziat. ch.

B_2 : második víziat.
együttható

kísérlet.	w_2 (g/l)	π (atm)	π/w_2 (atm/g l ⁻¹)
	10	0.011	0.0011
	20	0.024	0.0012
	30	0.039	0.0013

$$\frac{\bar{u}}{w_2} = RT \frac{1}{M_2} + RT B_2 w_2$$

abszolút: $\frac{\bar{u}}{w_2} - w_2 = +$



$$\bar{u} = RT C = RT \ln C \quad \leftarrow \quad RT \Delta C$$

NaCl oldat (fiziológiai a.)

$$G = \mu_{H_2O} n_{H_2O} + \mu_{NaCl} n_{NaCl} \quad \text{additivitás}$$

$$G_{\pm} \quad \mu_{+} = \mu_{Na^{+}} \quad \mu_{-} = \mu_{Cl^{-}}$$

$$\mu_{+} = \mu_{+}^{\circ} + RT \ln \gamma_{+} C_{+}$$

$$\mu_{-} = \mu_{-}^{\circ} + RT \ln \gamma_{-} C_{-}$$

$$\mu_{NaCl} = \mu_{+} + \mu_{-} = \mu_{+}^{\circ} + RT \ln \gamma_{+} C_{+} + \mu_{-}^{\circ} + RT \ln \gamma_{-} C_{-}$$

Def $\mu_{\pm} = \frac{\mu_{+}^{\circ} + \mu_{-}^{\circ}}{2}$ közepes standard
 $\gamma_{\pm}^2 = \gamma_{+} \gamma_{-}$ ion közei potenciál
 közepes ion aktivitási
 együttható

$$\mu_{NaCl} = 2\mu_{\pm}^{\circ} + RT \ln \gamma_{\pm} C_{+} C_{-}$$



$$\bar{u} = RT [P^{\circ}] + RT [Na^{+}]$$

$$[P^{\circ}] = a$$

$$[Na^{+}] = a$$

$$b \gg a$$

$$\bar{u} = 2RTa$$



kerdes	A	B	egyensúly	
			A	B
$[P^{\circ}]$	a	0	a	0
$[Na^{+}]$	a	b	a+x	b-x
$[Cl^{-}]$	0	b	x	b-x

$$K_a = \frac{[Na^{+}]_A [Cl^{-}]_A}{[NaCl]_A} = \frac{[Na^{+}]_B [Cl^{-}]_B}{[NaCl]_B}$$

$$(a+x)x = (b-x)^2 \Rightarrow x = \frac{b^2}{a+2b}$$

$$\bar{u} = RT (a + a+x - (b-x) - (b-x)) = RT (2a + 4x - 2b)$$

$$\text{ha } b=0 \quad \bar{u} = 2a$$

$$\bar{u} = \left(\frac{2a^2 + 2ab}{a+2b} \right) RT$$

$$b \gg a \quad \bar{u} = a$$

$$a = 10^{-5} M$$

$$\Delta \Phi_0 \quad \text{Donnan-potenciál}$$

$$\Delta \Phi_0 \approx 360 \text{ mV}$$

ha $\phi > 0$ munkát végzünk
 $\phi < 0$ munkát nyelünk

$$F C^{-1} = V$$

$$F = N_A \cdot e = 96493 \text{ C/mol}$$

konverziós
faktor, Faraday

$$W = 2 \cdot N_A \cdot e \cdot \phi = 2 \cdot F \cdot \phi$$

elemi töltés ($1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$)

$$\Delta \phi_0 = \phi_B - \phi_A$$

$\bar{\mu}$: el. kémiai pot.

$$(\bar{\mu}_+)_A = (\bar{\mu}_+)_B \quad \bar{\mu}_A^0 = \bar{\mu}_B^0$$

$$\bar{\mu}_B^0 + RT \ln (\gamma_+ C_+)_B + 2 F \phi_B = \bar{\mu}_A^0 + RT \ln (\gamma_+ C_+)_A + 2 F \phi_A$$

$$RT \ln \frac{(\gamma_+ C_+)_B}{(\gamma_+ C_+)_A}$$

$$\Delta \phi_0 = - \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{(C_+)_B}{(C_+)_A} \right)$$

hisz adott: ha $\gamma_+ \approx 1$
 $\Delta \phi \approx 360 \text{ mV}$

$$+ [NaCl] = b \rightarrow 3$$

$$\Delta \phi = - \frac{RT}{2F} \ln \frac{b-x}{b+x}$$

$$\Delta \phi = - \frac{RT}{2F} \ln \frac{b}{a+b} \quad \leftarrow x = \frac{b^2}{a+b}$$

$$\text{ha } b=0 \quad \ln \frac{0}{a} = -\infty$$

$$\text{ha } b \gg a \quad \ln 1 = 0$$

Debye-Hückel elmélet

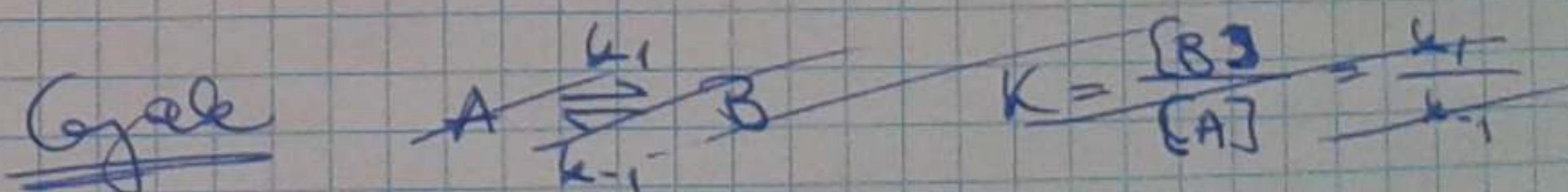
$$\gamma_{\pm} = -0,51 |z_+ z_-| I^{1/2}$$

$$I \equiv \frac{1}{2} \sum c_i z_i^2$$

NaCl	0,01 M	0,01
CuSO ₄	0,01 M	0,04

$$25^\circ \text{C} \quad K_D \leq 1$$

$\gamma_+ \gamma_-$



hisz mo.

$$k = A \cdot e^{-E^{\ddagger}/RT}$$

(Arrhenius egyenlet)

$$\Delta G^0 = - RT \ln K_{eq}$$

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln \frac{[B]}{[A]}$$

$$\Delta G < 0 \rightarrow \text{spontán}$$

$$\mu_1 = \mu_1^0 + RT \ln x_1$$

$$K = \frac{x_c^c x_d^d}{x_a^a x_b^b}$$

pedig a rx egyensúlya
általadójá

GYAB anyag

① Egy fehérje $M_w = 30 \text{ kDa}$

$C = 20 \text{ g/dm}^3$ koncentrációban vízbe oldunk,

oszmózisnyomása (20°C -on) $\pi_{\text{fehérje}} = 0,096 \text{ atm}$

Hány Na^+ -ion disszociál le egy fehérjemolekulából?

$$R = 0,0821 \text{ dm}^3 \cdot \text{atm} / \text{mol} \cdot \text{K}$$

$$\pi_{\text{fehérje}} = R \cdot T \cdot C_{\text{fehérje}} = 0,0821 \cdot 293 \cdot \frac{20 \frac{\text{g}}{\text{dm}^3}}{30000 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,016 \text{ atm}$$

$$1 \text{ Da} = 1 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$n_{\text{Na}^+} = \frac{\pi_{\text{fehérje+ionok}}}{\pi_{\text{fehérje}}} - 1 = \frac{0,096}{0,016} - 1 = 5$$

5 Na^+ -ion disszociál le.

$$n = \frac{\pi_{\text{fehérje+ionok}}}{\pi_{\text{fehérje}}} - 1$$

oszmózisnyomás úszel számok

$$\pi = RT \cdot (n+1) C$$

② Egg filthage $w_{\text{filth}} = 10 \frac{\text{g}}{\text{dm}^3}$ bone.

standard osmotic pressure $\pi_{\text{filth}} = 0,0366 \text{ atm}$

$M_{\text{filth}} = ?$, 2 Na⁺ dissociation

$R = 0,0821 \frac{\text{dm}^3 \cdot \text{atm}}{\text{K} \cdot \text{mol}}$

$$\frac{\pi_{\text{mech}}}{\pi_{\text{filth}}} - 1 = n_{\text{Na}^+}$$

$$\frac{0,0366}{\pi_{\text{filth}}} - 1 = 3$$

$\pi_{\text{filth}} = 0,0122 \text{ atm}$

$\pi_{\text{filth}} = R \cdot T \cdot c_{\text{filth}} = 0,0821 \cdot 298 \cdot c_{\text{filth}} = 0,0122$

$$c_{\text{filth}} = \frac{\pi_{\text{filth}}}{R \cdot T} = \frac{0,0122}{0,0821 \cdot 298} \approx 0,0005 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$c_{\text{filth}} = \frac{w_{\text{filth}}}{M_{\text{filth}}}$$

$$M_{\text{filth}} = \frac{w}{c} = 20000 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 20 \text{ kDa}$$

③ $\pi = ?$ (25°C)

$10 \frac{\text{g}}{\text{dm}^3}$ hemoglobin (64000 g/mol)

$10 \frac{\text{g}}{\text{dm}^3}$ myoglobin (16000 g/mol)

$R = 0,0821 \frac{\text{atm} \cdot \text{dm}^3}{\text{K} \cdot \text{mol}}$

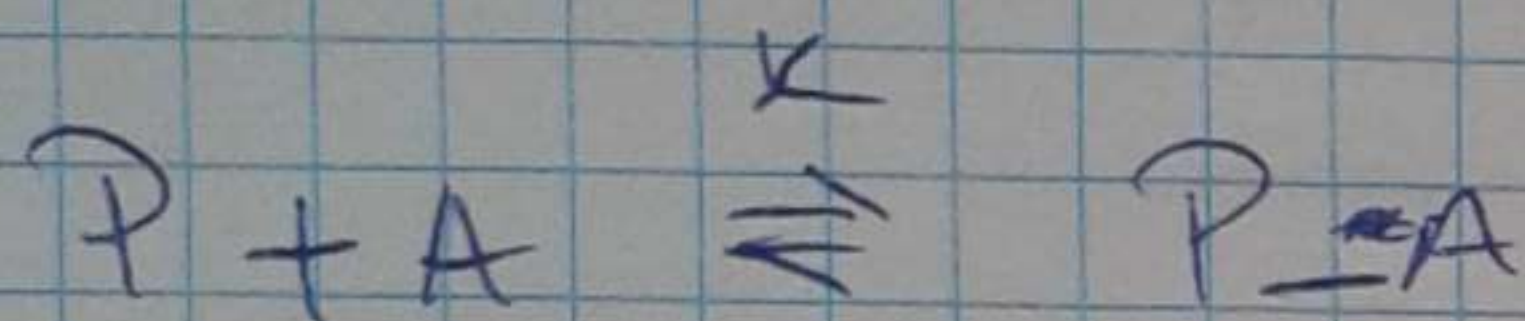
$$\begin{aligned} \pi &= R \cdot T \cdot C = RT \left(\frac{w_1}{M_1} + \frac{w_2}{M_2} \right) = \\ &= 0,0821 \cdot 298 \cdot \left(\frac{10}{64000} + \frac{10}{16000} \right) \end{aligned}$$

Többszörös egyenlő
 → kooperatívitás

Fehérjék szerkeze

→ kovalens, nem kovalens kötés

Fehérjék feltekeredése



$$K = \frac{[P-A]}{[P][A]}$$

$$\bar{v} = \frac{[P-A]}{[P-A] + [P]}$$

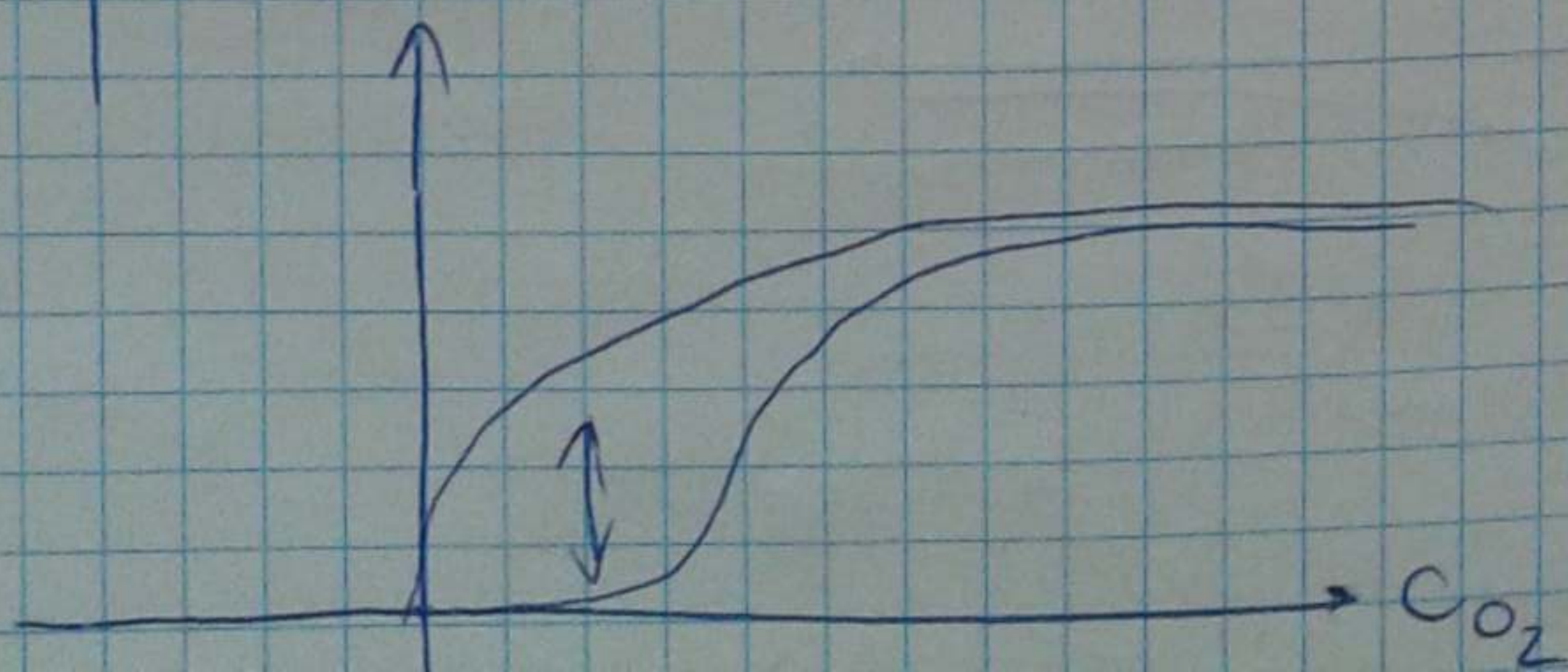
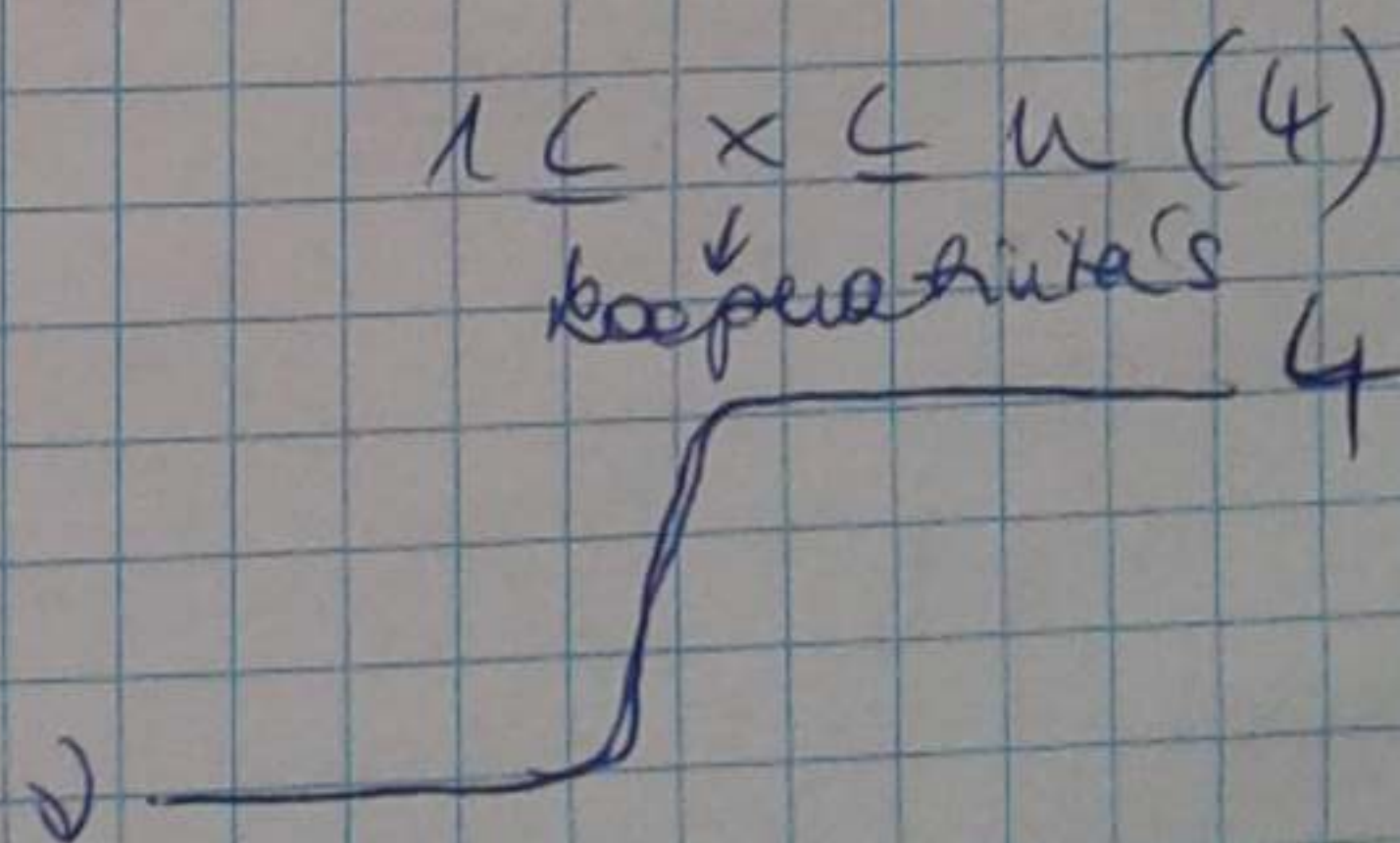
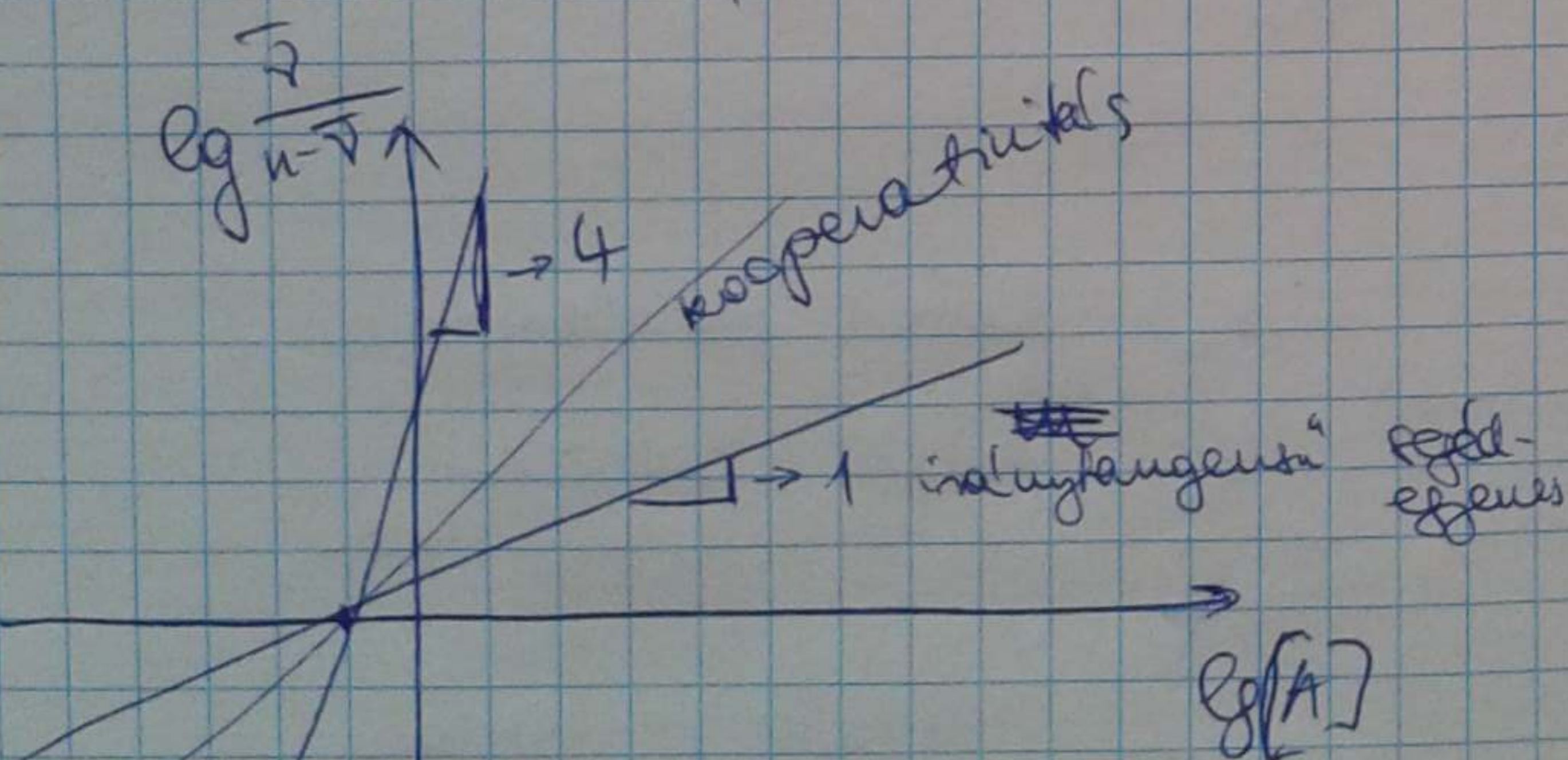
$$\Rightarrow \bar{v} = \frac{n K [A]}{1 + K [A]}$$

~~log~~ $\log \left(\frac{\bar{v}}{n - \bar{v}} \right)$ vs $\log [A]$

$$\bar{v} = \frac{n K [A]^x}{1 + K [A]^x}$$

$n=4$

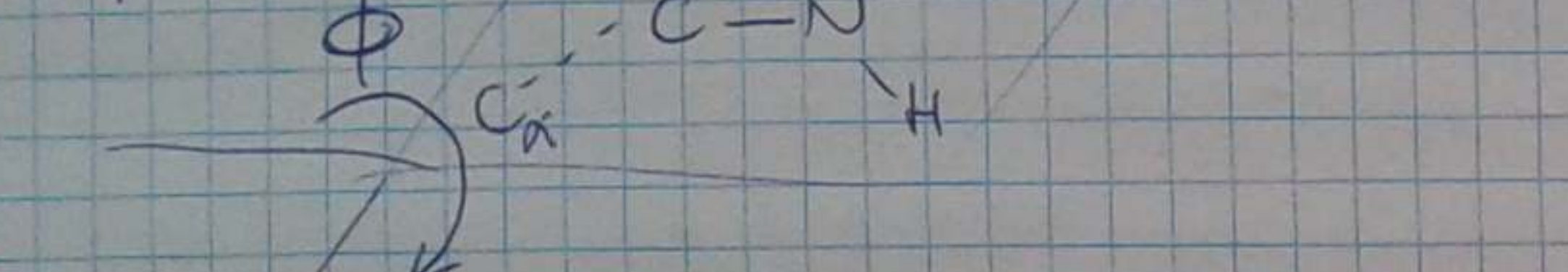
$1 \leq x \leq n (4)$
 kooperatívitás



hemoglobin (kooperatív)
 miooglobin

Fehérjék szerkezete

peptidkötés



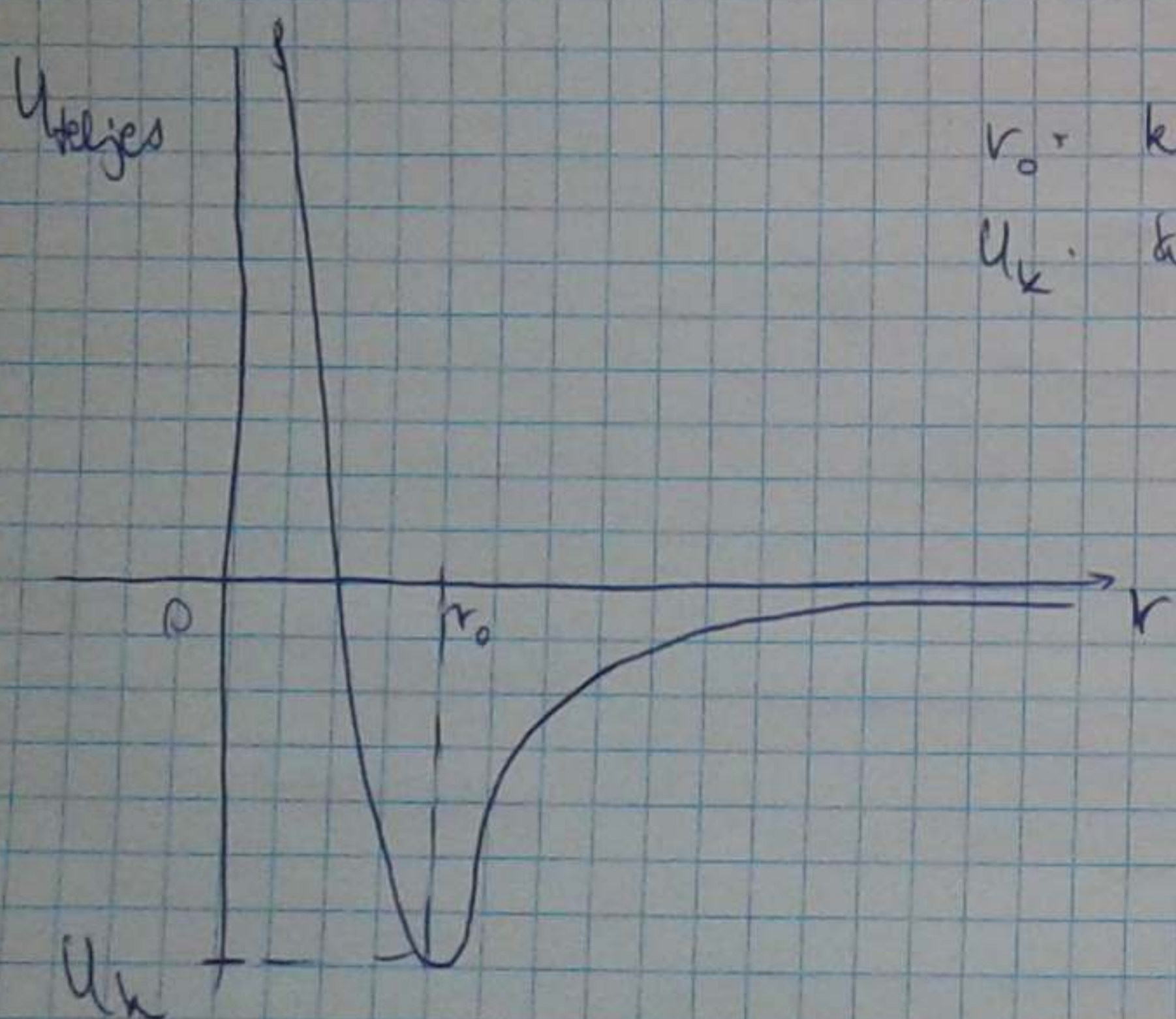
hullámfüggvény (ψ)
(magabau & fázis eltolás)

Schrodinger-egyenlet megoldása

ψ² : a legerősebb megfigyelési valószínűség



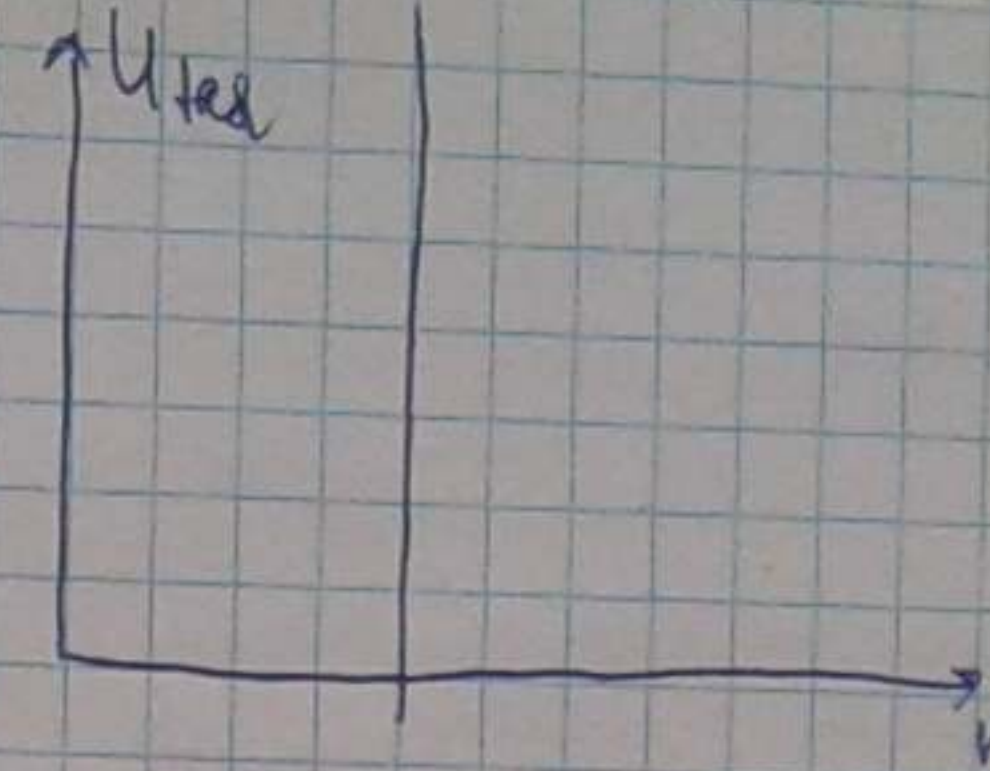
Ramachandran plot



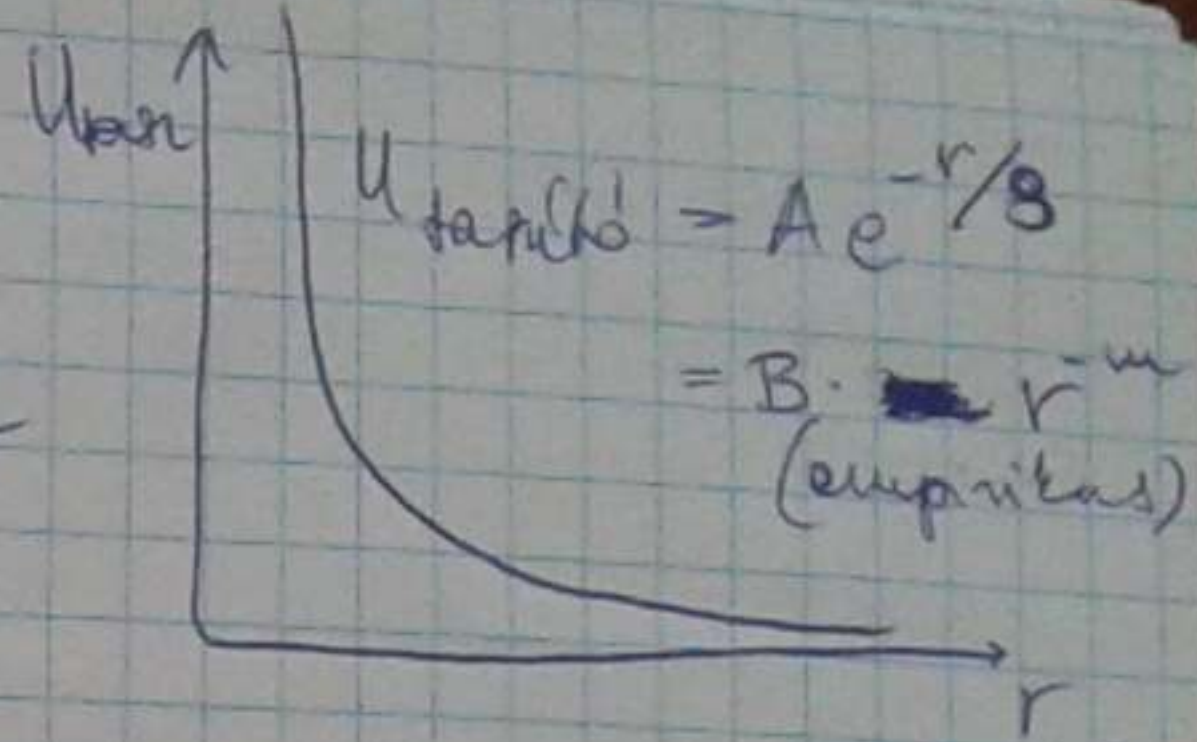
r₀ : kötési távolság
U_k : kötési energia

tapaszt = r₀

Tároló



es a
valószínűség



Vonás

(Coulomb)

kötés-kötés

— — dipólus

dipólus — —

kötés-indukált dipólus

dipólus — —

1. kötés-kötés

$$F = \frac{z_1 z_2}{D r^2}$$

$$\frac{\partial U_{\text{vonás}}}{\partial r} = F = \frac{z_1 z_2}{D r^2}$$

$$U_{\text{vonás}} = -\frac{e^2 N}{D r}$$

$$U_{\text{tota}} = U_{\text{vonás}} + U_{\text{tasz}} =$$

$$= -\frac{e^2 N}{D r} + A e^{-\frac{r}{b}}$$

$$U_{\text{kötés}} = -\left(\frac{N e^2}{D r_0}\right) \left(1 - \frac{b}{r}\right)$$

(kötési energia)

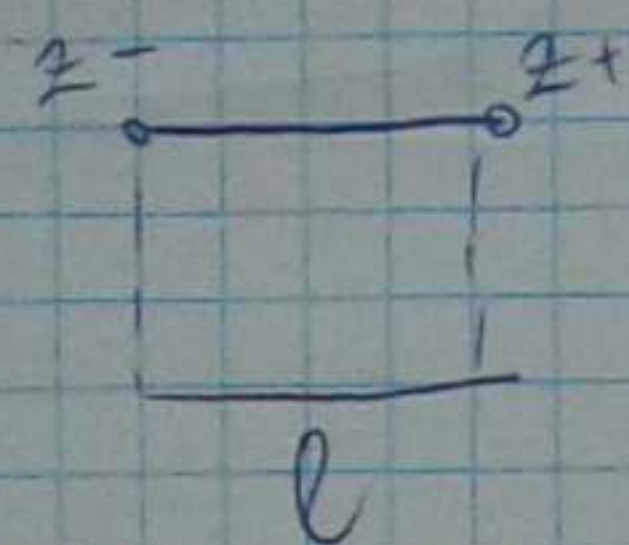
$$r_0 = 2,81 \text{ \AA}$$

$$b = 0,34 \text{ \AA}$$

$$U_{\text{kötés}} = -\frac{(6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}) (4,8 \times 10^{-10} \text{ es})}{1 \cdot (2,81 \times 10^{-8} \text{ cm})} \left(1 - \frac{0,34 \times 10^{-8}}{2,81 \times 10^{-8}}\right)$$

$$= -(4,34 \times 10^{12} \text{ erg/mol}) \left(\frac{1}{10^{12} \text{ erg}}\right) \left(\frac{1 \text{ cal}}{4,184 \text{ J}}\right) = -104 \text{ kcal/mol}$$

$$D_{H_2O} = 80 \quad \frac{104}{80} = 1.2 \text{ kcal/mol}$$



$$\vec{\mu} = |z| \vec{e} \quad e = 4.8 \cdot 10^{-10} \text{ esu}$$

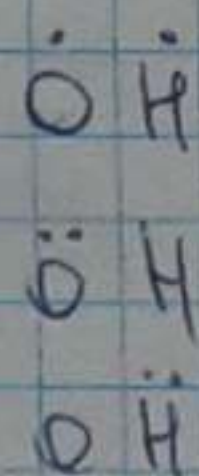
$$\bar{\mu} = (4.8 \cdot 10^{-10} \text{ esu}) \cdot (1 \cdot 10^{-8} \text{ cm}) \approx 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{cm}$$

$$(10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{cm} = 1 \text{ Debye})$$

$$\Psi_1, \Psi_2 \quad \Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$$

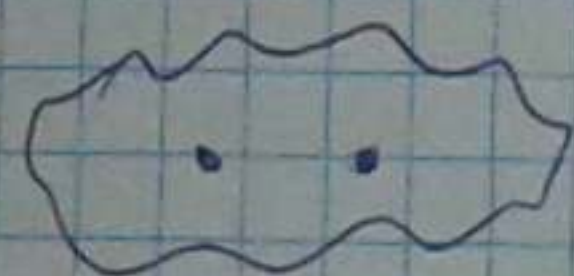
$$c_1 \neq c_2$$

$$|\vec{\mu}| = 1.85 \text{ D}$$



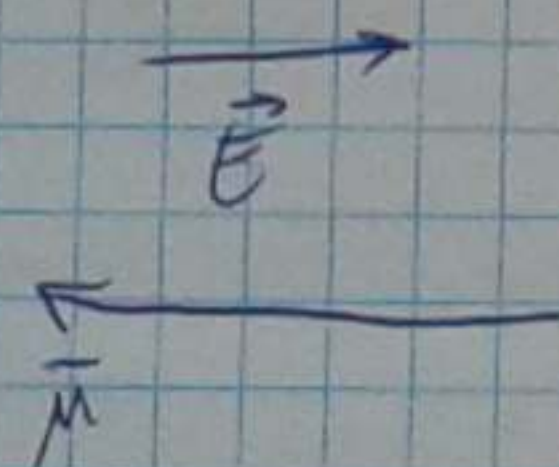
$$\bar{\mu} = \sum E_i z_i r_i + \int z \bar{r} d\tau$$

electron



$$\bar{\mu}_{ind} = -\alpha \vec{E}$$

↓
polarizálhatóság
(kényszer)



$$\chi_{\text{mol}} = [1] \text{ Ba m} = 10^{-24} \text{ cm}^3$$

$$\chi_{\text{mol}} = 144 \text{ B}$$

toleráns - toleráns

$$U_{\text{ind}} = -\frac{N z_1 z_2}{Dr}$$

toleráns - dipól

$$U_{\text{ind}} = -\frac{N \bar{\mu} z_2}{Dr^2}$$

dipól - dipól

$$U_{\text{ind}} = -\frac{N \bar{\mu}_1 \bar{\mu}_2}{Dr^3}$$

2011. 11. 23. sz.

enzim → kofaktor

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_{\text{eq}}$$

aktiválási energia csökkenés

fehérjék, RNS (ribonim)

$$k = A \cdot e^{-E^\ddagger/RT}$$

kofaktorok: pl. fehérje, koenzim

↓
reális molekula/komplex

proteolitikus csoport kovalensen kötött koenzim

hidroxiim = fehérje + koenzim

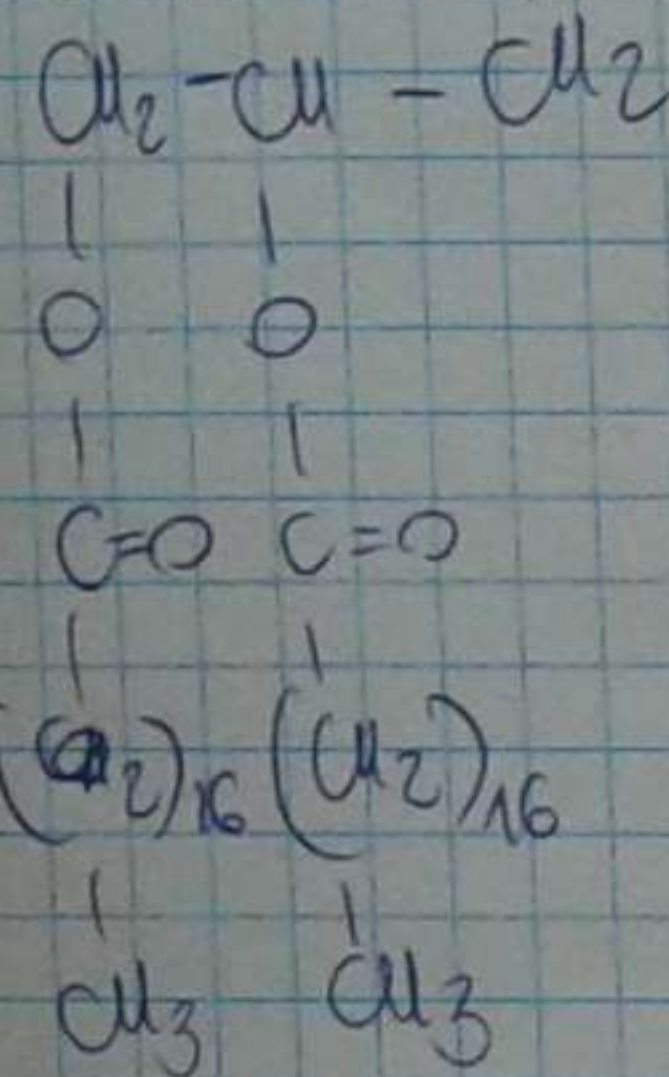
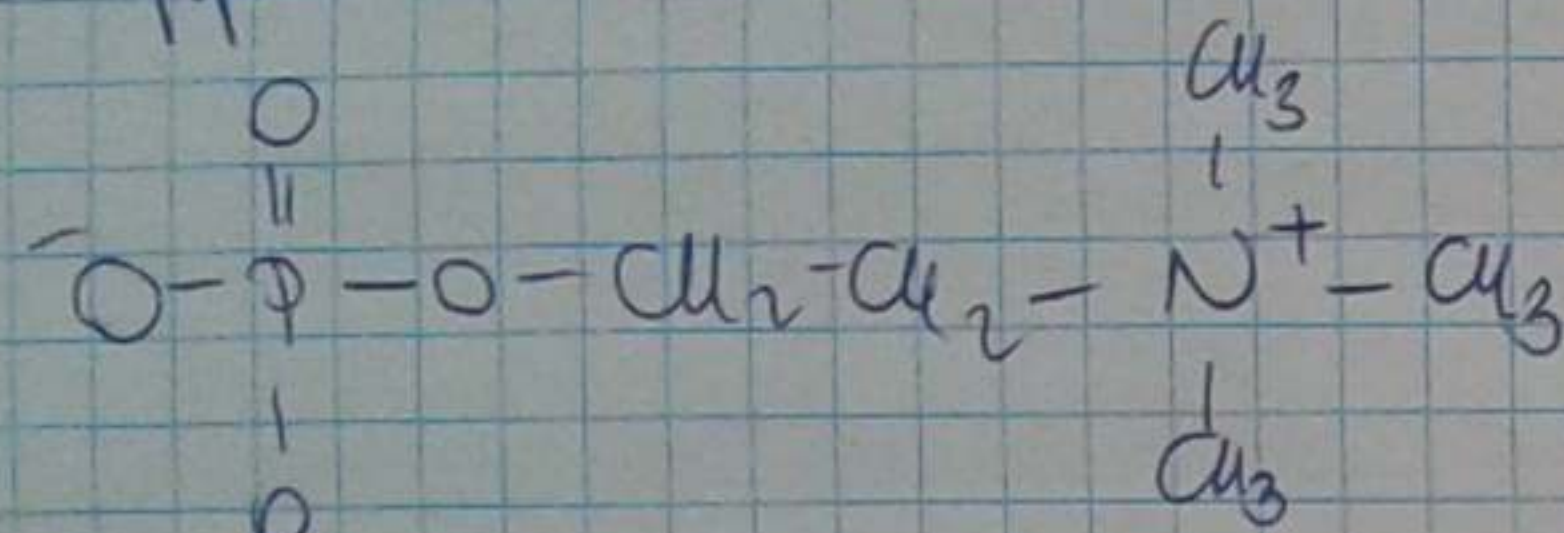
apoenzim = fehérje



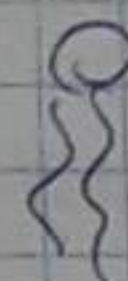
2011. 12. 07. sz.

membrántransport fosfolipidek

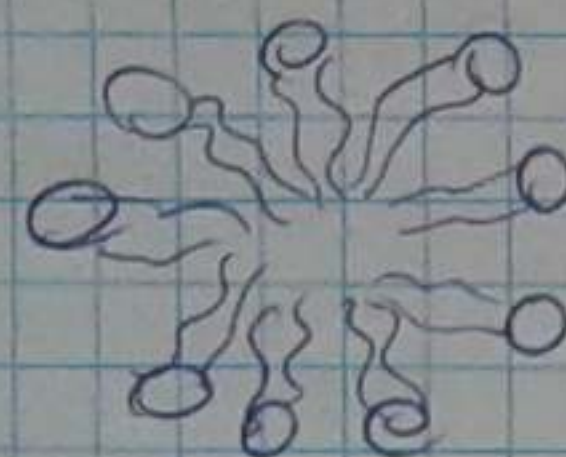
amfipátus molekula



fosfolipidic kolin

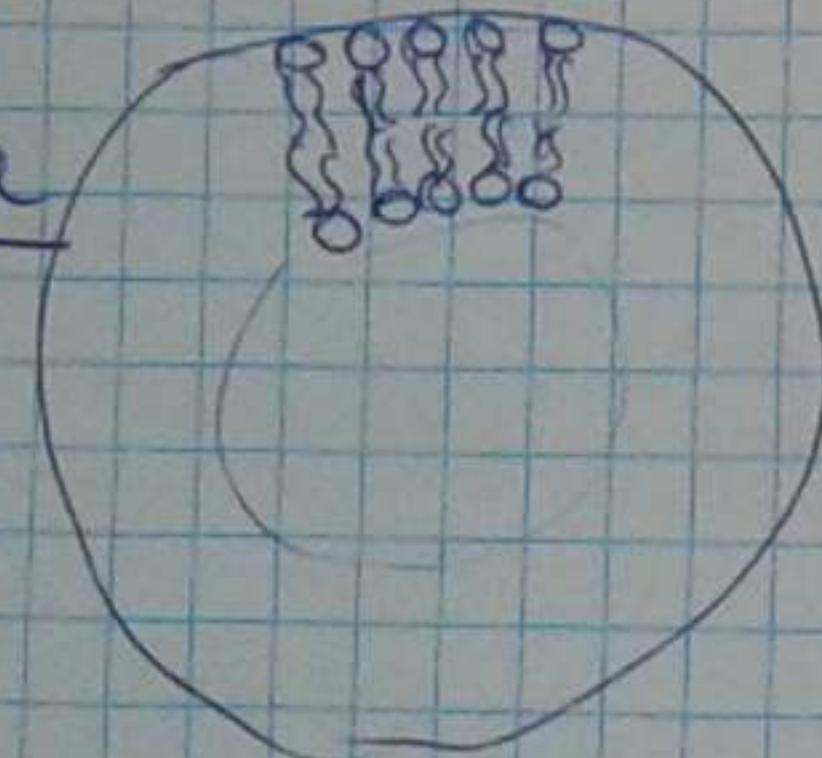


micella



a membránban kétfős réteg

lipidkóma

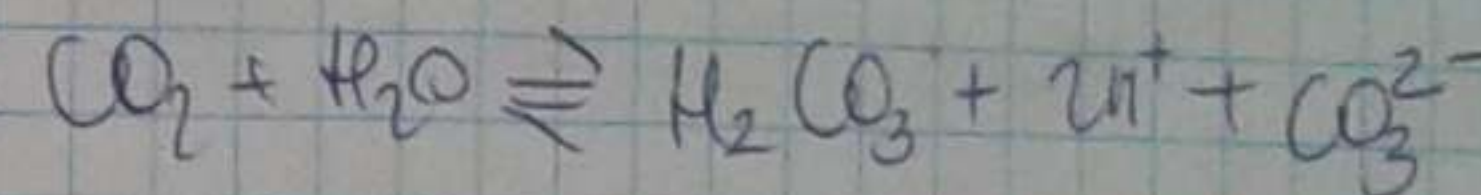


a membránban kétfős réteg + felületi molekulák
↓
elválaszt és összeköt

membrántransport

egyszerű diffúzió O_2
és a sejtek baktérium: 1-2 μm
mikroorganizmusok: 5-100 μm
állati sejtek: 5-100 μm
zöld alga: 3 μm

vegyes átvitel



steroid hormonok

felületi által közvetített transport
→ elektrokémiai gradiens irányába

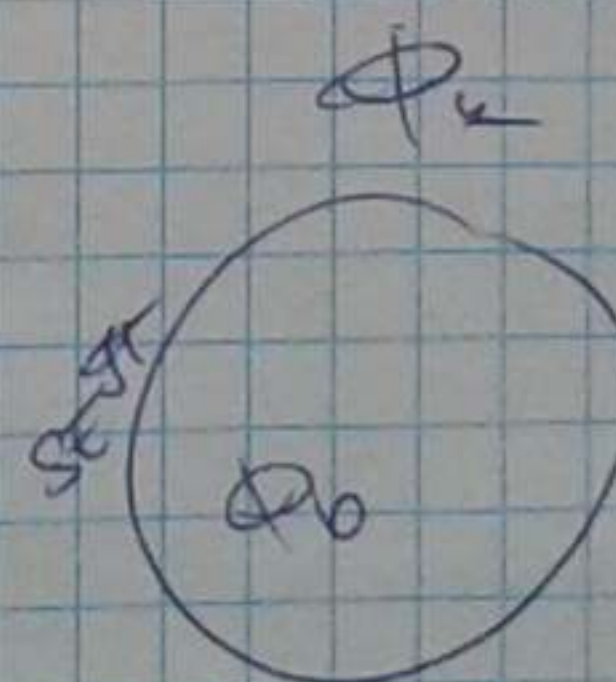
passzív transport

→ elektros. grad-sal szembe
aktív transport

↳ közvetlen
↳ közvetett

$$\mu = \mu^0 + RT \ln C + z \cdot F \phi \quad \left(\frac{F}{\text{mol}} \right)$$

$$V = \frac{F}{\text{coulomb}}$$



$$\Delta \phi = \phi_0 - \phi_e$$

$$\Delta \phi = -70 \text{--} 80 \text{ mV}$$

$$\mu_1 = \mu^0 + RT \ln [M^+]_k + z \cdot F \Phi_k$$

①

$$\mu_b = \mu_k$$

$$z \cdot F \Phi_b - z \cdot F \Phi_k = RT \ln [M^+]_k - RT \ln [M^+]_b$$

$$z \cdot F (\Phi_b - \Phi_k) = RT \ln \frac{[M^+]_k}{[M^+]_b}$$

$$\Delta \Phi = \Phi_b - \Phi_k = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{[M^+]_k}{[M^+]_b}$$

~~Nernst~~ ^{K⁺}
Nernst

②

$$\mu_b \neq \mu_k$$

$$\mu_k - \mu_b = \Delta G \left(\frac{J}{mol} \right)$$

$$\Delta G = \mu^0 + RT \ln [M^+]_k + z \cdot F \Phi_k - \mu^0 - RT \ln [M^+]_b - z \cdot F \Phi_b$$

$$\Delta G = RT \ln \frac{[M^+]_k}{[M^+]_b} + z \cdot F (\Phi_k - \Phi_b) - z \cdot F \Delta \Phi$$

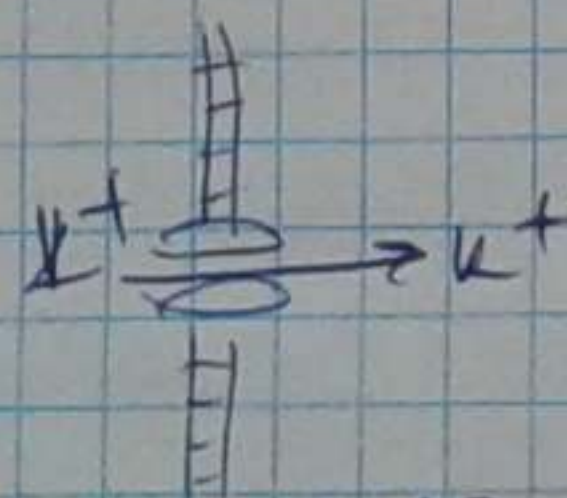
ioncsatorna - mikroszkopos

alagút nem választja

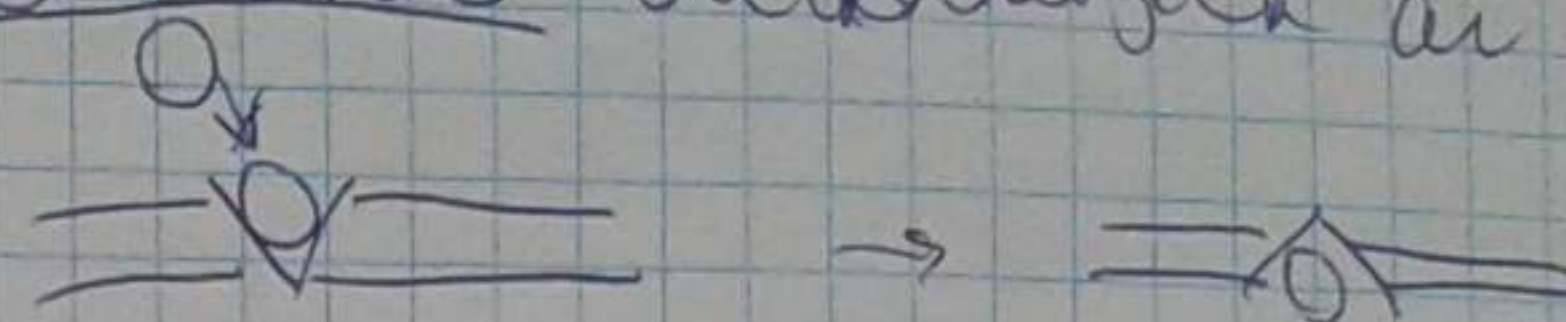
selektív

csak passzív transzport

lehet nyitott vagy zárt → ligandum gátlás (allantoxin)
→ feszültség gátlás



camerek: választás az alagúttól



egyszer csak egy irányba nyitott

aktív és passzív transzportra is képesek

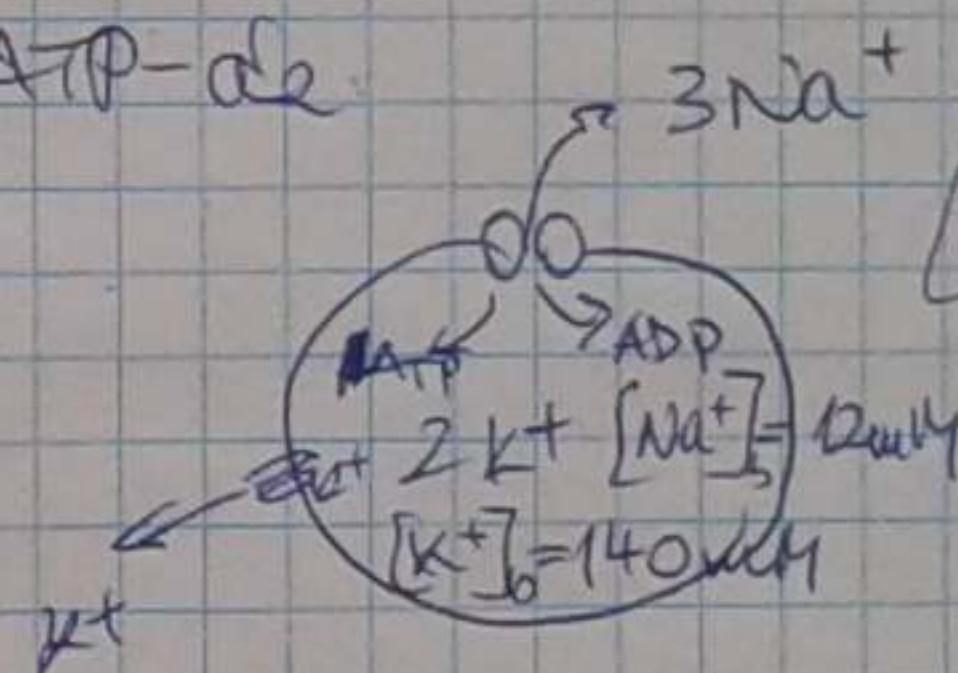
* transzport feléje

1) (ion)csatorna

2) camerek

Na⁺-K⁺-ATP-áz

25%



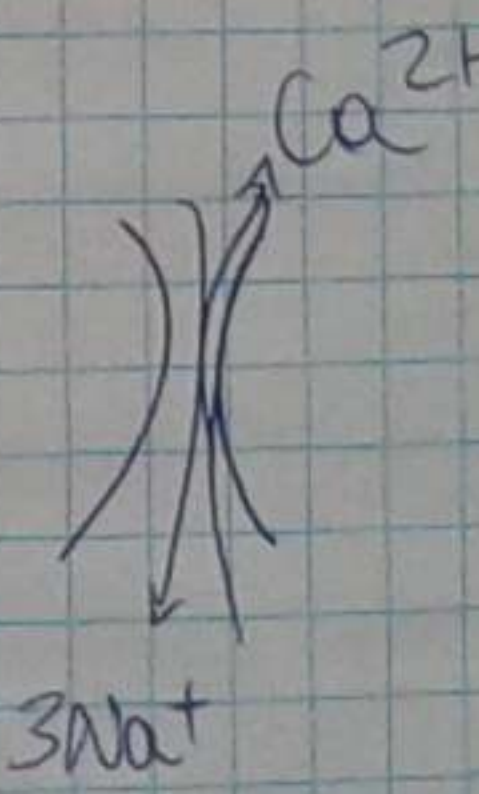
$$[Na^+]_k = 145 \text{ mM}$$

$$[K^+]_k = 4 \text{ mM}$$

$$\Delta \Phi = -70; -80 \text{ mV}$$

Ca²⁺-ATP-áz

Na⁺-Ca²⁺-~~csatorna~~ csatorna



	kint (+)	bent (+)
K ⁺	4 mM	140 mM
Na ⁺	145 mM	12 mM
Cl ⁻	100 mM	5 mM
Ca ²⁺	2 mM	100 nM

⊙

① Egy sejten nyugalmi membránpotenciálja
 37°C -en -80 mV

Mekkora belső $[K^+]_i$ kell ennek
 fenntartásához, ha a külső $[K^+]_o$
 körülbelül 50 mM -ra van?

$$\Delta\phi = \frac{RT}{zF} \ln \frac{[K^+]_i}{[K^+]_o}$$

$$\Delta\phi = -0,08\text{ V}$$

$$[K^+]_o = 0,05\text{ M}$$

$$F = 96500\text{ C/mol}$$

$$R = 8,314\text{ J/mol}\cdot\text{K}$$

$$T = 310\text{ K}$$

$$\frac{\Delta\phi \cdot zF}{RT} = \ln \frac{[K^+]_i}{[K^+]_o}$$

$$[K^+]_o = 1\text{ M}$$

② A Hargis ember sejten belül $[K^+] = 140\text{ mM}$
 kívül 5 mM ($T = 37^\circ\text{C}$)

Mekkora pot. különbség?

$$\Delta\phi = \frac{RT}{zF} \ln \frac{[K^+]_i}{[K^+]_o} = -89\text{ mV}$$

Most szabadon át tud menni a K^+

Mekkora munkát végez a Na^+/K^+ -at pumpa
 ahogy legalább 1 mol Na^+ -t sejten kívüre
 pumpáljon, ha a $[Na^+]_i = 145\text{ mM}$
 $[Na^+]_o = 12\text{ mM}$

$$\Delta\bar{G} = RT \ln \frac{[Na^+]_i}{[Na^+]_o} + zF(\phi_i - \phi_o)$$

$$= -2F\Delta\phi$$

$$\Delta G = \Delta\bar{G} \cdot n$$

$$\Delta\bar{G} = 15,01\text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G = 15,01\text{ kJ}$$

jegyzet (2011.12.13.)

ionerősség: $I = \frac{1}{2} \sum c_i z_i^2$

pl	konc (M)	I
NaCl	0,01	0,01
CuSO_4	0,01	0,04
CaCl_2	0,01	0,03

közepes aktivitási koefficiens ($\gamma_{\pm}$) def. $\gamma_{\pm} = \sqrt{\gamma_+ \gamma_-}$

γ_+ a $\oplus$ töltéshordozók

γ_- a $\ominus$ töltéshordozók aktivitási
 koefficiense

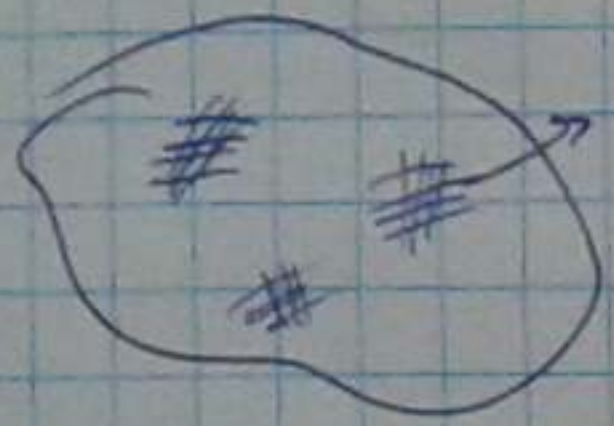
a Debye-Hückel elmélet

$$\log \gamma_{\pm} = -0,51 |z_+ z_-| I^{\frac{1}{2}}$$

2011. 12. 14. ne

Halobacterium ~~melit~~ halobium (halo-so)

(sőt tavakban élnek, közvetlenül a felnyitás napján)

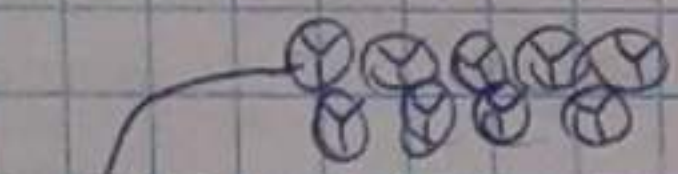


lela foler

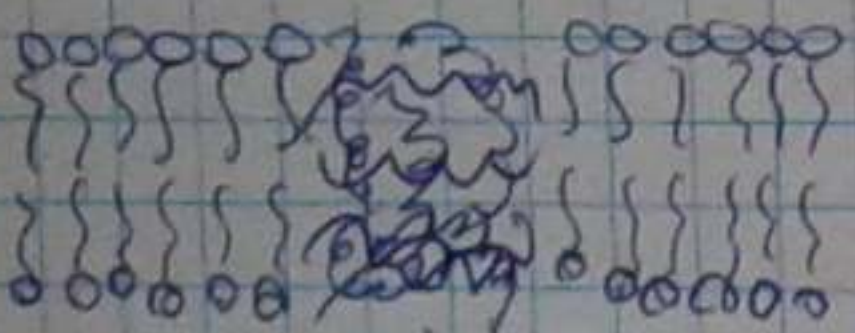
retinal: felyelnyó pigment
bakteria ~~rodospin~~ fehére

$$\hookrightarrow (26000 \text{ Pa})$$

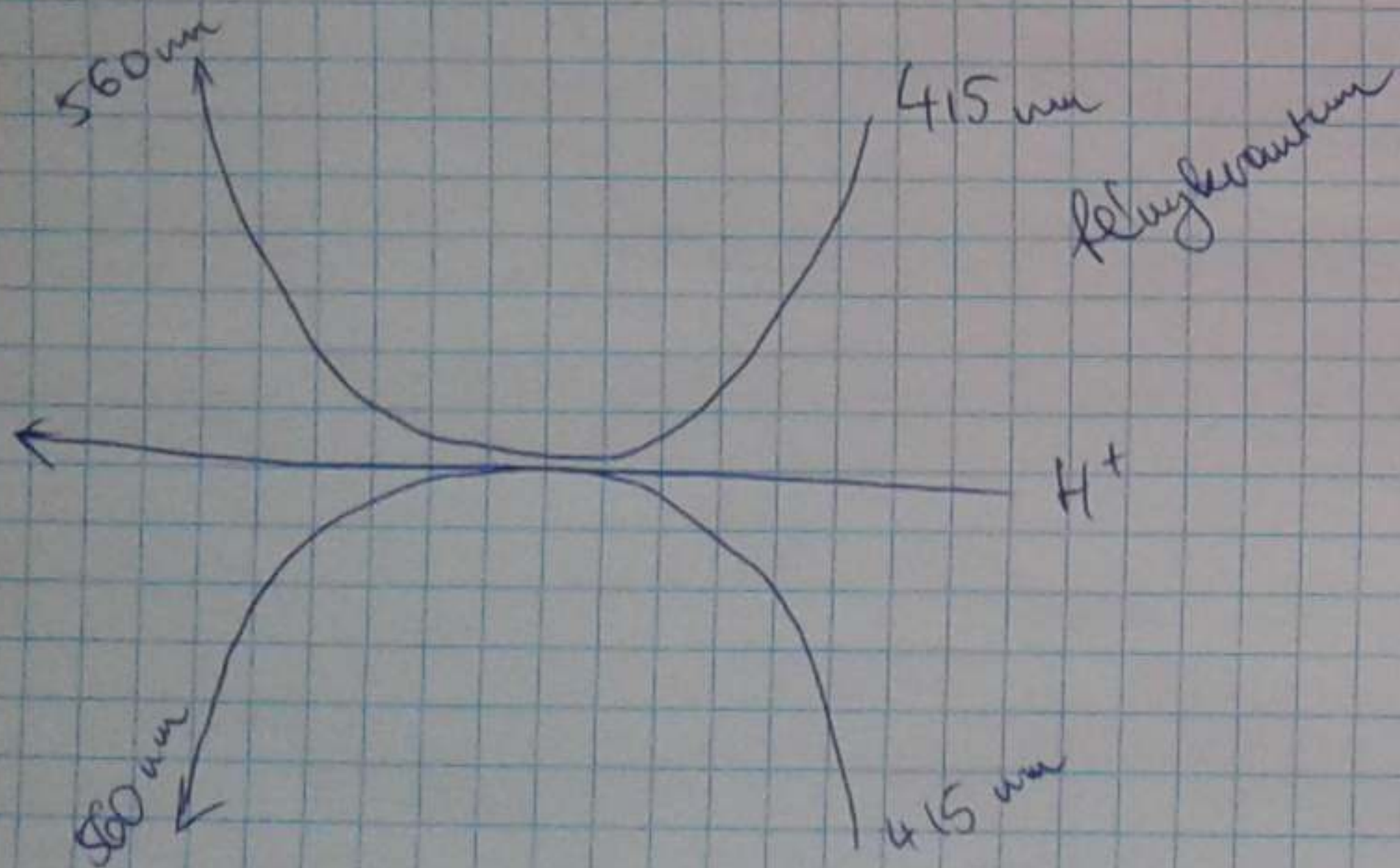
vorliegen diffraction 3D center



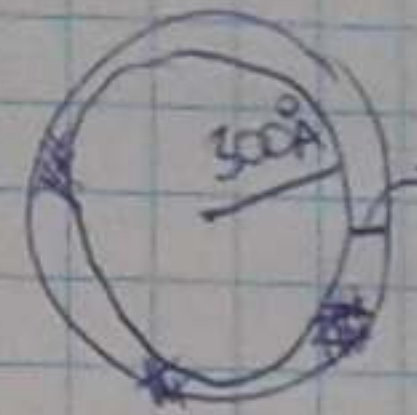
↙ Kunstalybau fñnerrek
eg-eg baht ndapsun



↓
7 Helix → 3 frühe 4 ferde



Verikuluus



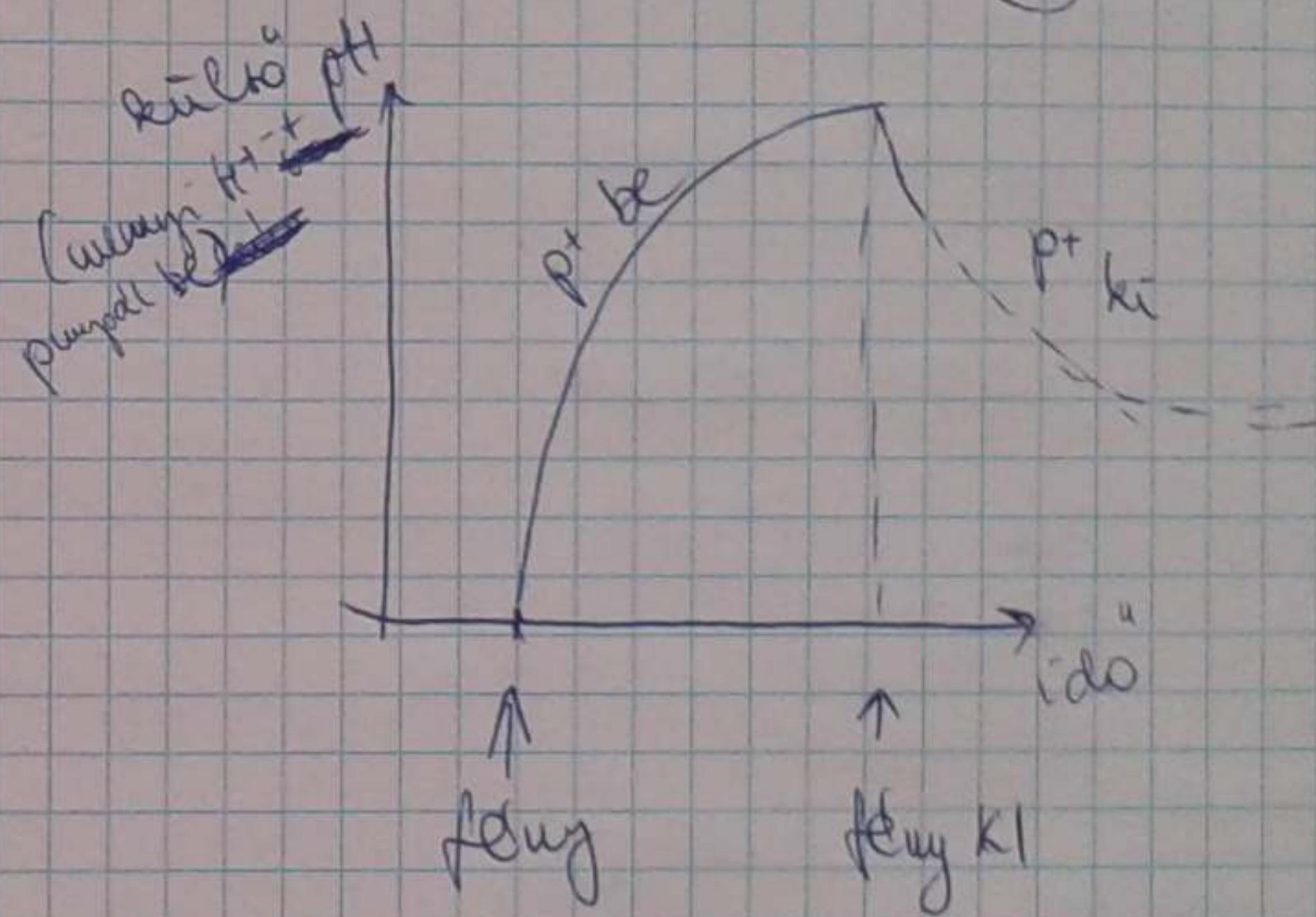
USA postlijad ^{Siem} ~~Siem~~ i keldsa
(ösendrak)

0,15 M - 0,3 KCl - ben

~ 9 -es pH-n

Ezen minden nevelőnek
lelte a baciól

a membrane
barrier
a ~~top~~ redox point



→ mehr's $9 \cdot 10^{-9} \text{ mol}$ ~~fl⁺ ml~~ ~~beac.~~

~~Valantals~~
valantals sendere

pH a vezikulában

$$H^+ \# / \text{verk} = \frac{9 \cdot 10^9 \text{ mol/l} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} H^+ / \text{mol}}{3,18 \cdot 10^{12} \text{ verkslu/wk}} = 1703 H^+ / \text{verkslu}$$

pfe. bewert. 8,95 ~ 9,00

suatun/pt pH belul 1,6

felület

$$VC = Q$$

fel. kor. felület

$$V = \Delta\phi = \frac{Q}{C}$$

$$a = 1703 \text{ H}^+$$

$$\rightarrow 1703 e$$

$$1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Coulomb}$$

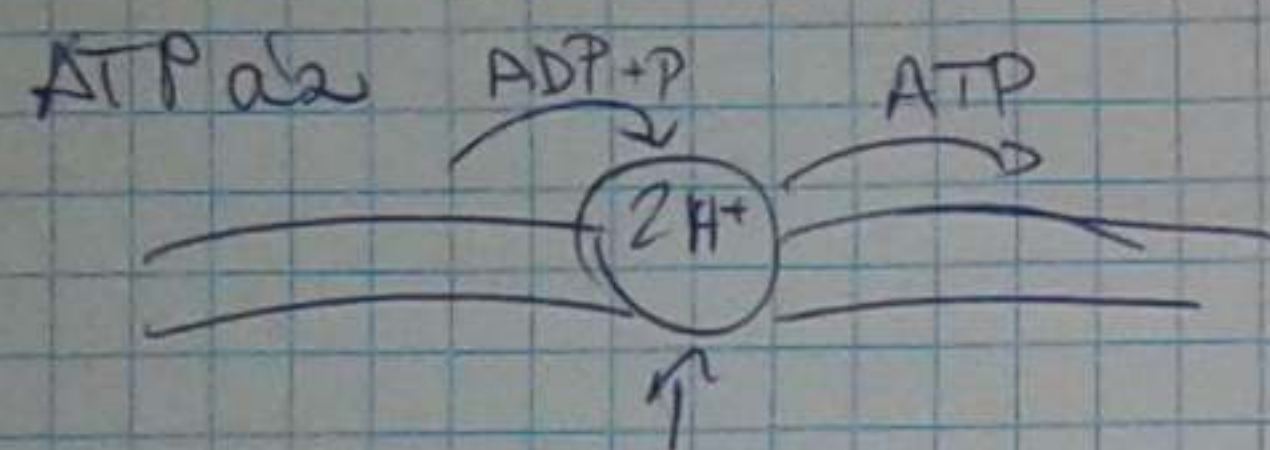
$$\Delta\phi = 360 \text{ mV}$$

$$C = 4\pi\epsilon_0 \frac{ab}{b-a}$$

permeabilitás

$$\left(\frac{\text{útes tére}}{8.25 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Coulomb}}{\text{Vm}}} \right)$$

$$|E| = \frac{Vd}{Cm} = \frac{360 \text{ mV}}{4.5 \cdot 10^{-10} \text{ cm}} = 100000 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$$



Gyak

$$[E] = 10^{-4} \text{ M} \quad K_d = 9.7 \cdot 10^{-7} \text{ M}$$

$$[FMN]_{A(0)} = 9.242 \cdot 10^{-4} \text{ M}$$

$$[FMN]_{B(0)} = 7.667 \cdot 10^{-5} \text{ M}$$

$$[FMN]_{\text{ben}} = 10^{-3} \text{ M}$$

D = diellitomas allando
urel: 80
levegő: 1
membran: 30

$\frac{V}{[FMN]_e}$	$M[FMN]_e$	$[FMN]_e$	$\frac{V}{[FMN]_e}$	$\frac{V}{[FMN]_e}$
	$7.667 \cdot 10^{-5}$			
	$9.242 \cdot 10^{-4}$			

VIZSGA!

Kinetika rendűség, sebesség

Ankennus: hő- sebesség el $\rightarrow$ akt. energia
vagy $\Delta T \rightarrow \Delta U$ váltakoz $\rightarrow$ -

exudizipomax's u'nel, valamely c. ismal sembe
Dannan-potential

Scatchard plot, elektromos vált.

Hill plot

Nerst-egyenlet

Seb olyanok, mint ami a gyakorlat
vagy mint a 2H-u, kis gaudelkondsal

0 lent