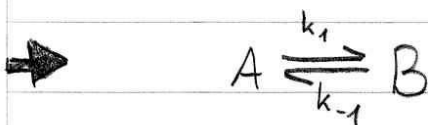


Molekuláris Biológia (PPKE-ITK)

- termodinamika = fenomenológiai módszert alkalmazó fizikai dg (tapasztalati tényekből, mérhető mennyiségekből von le következtetéseket, anyagi szerkezetet nem figyeli)

Kinetika:



- reverzibilis ($\rightleftharpoons$)
- k_1, k_{-1} sebességi állandók
- koncentrációk ($[A], [B]$) változnak

$K_{eq} =$ egyensúlyi állandó

rendszer egyensúlyban:
 $K_{eq} = k_1 = k_{-1}$

→ $K_{eq} = \frac{[B]_{eq}}{[A]_{eq}}$ - $[B]_{eq}$ = termék koncentrációja, mielőtt beállt egyensúly
- $[A]_{eq}$ = kiindulási anyag - II -

⇒ rendszerre vonatkozik !!! környezettel nem számol

→ Gibbs féle standard szabadenergia:

$$\Delta G_0 = -RT \ln K_{eq} = -RT \ln \frac{[B]_{eq}}{[A]_{eq}}$$

↳ rendszer egyensúlyi állapotához rendelt szám

⇒ szabadenergia: $\Delta G = \Delta G_0 + RT \ln \frac{[B]}{[A]}$
egyensúlyban $\emptyset$

$\frac{[B]}{[A]}$? K_{eq}	ΔG	happening
$=$	$\emptyset$	egyensúly
$<$	< 0	$A \rightarrow B$ spontán
$>$	> 0	$B \rightarrow A$ ↑

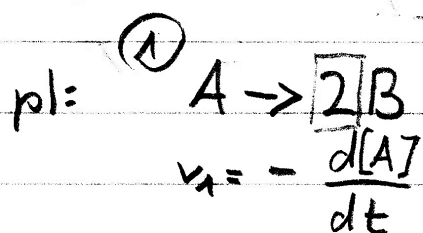
energiabefektetéssel változtathatunk

→ koncentráció: leghygyrabban $\frac{\text{mol}}{\text{l}}$, $\frac{\text{g}}{\text{e}}$, $\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$

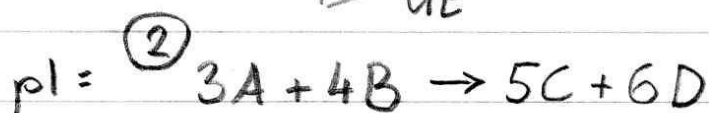
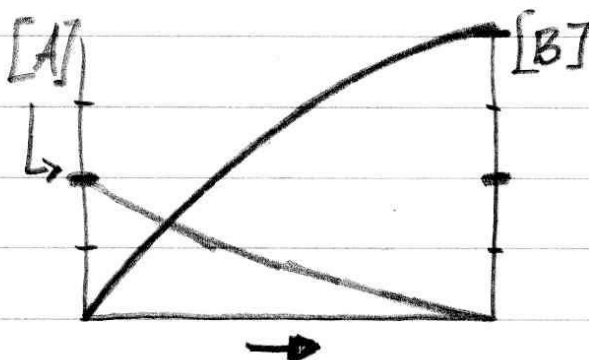
→ reakció sebesség: " v ", a koncentráció (c) időbeli változása

$v = f(c_1, c_2, \dots)$ $\Rightarrow$ ami fogy "-", ami termelődik "+"
előjellel

$\Rightarrow$ sztöchiometriai együtthatókkal osztunk

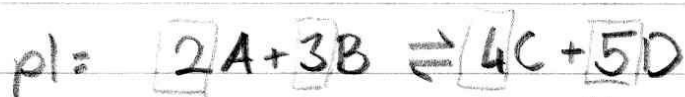


$$v_2 = + \frac{1}{2} \frac{d[B]}{dt}$$



$$v = -\frac{1}{3} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{4} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{5} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{6} \frac{d[D]}{dt}$$

→ sztöchiometriai együtthatók a sebességi
állandóban a litervőbe kerülnek



$$K = \frac{[C]^4 [D]^5}{[A]^2 [B]^3}$$

→ sebességi egyenlet kémiai reakcióra:



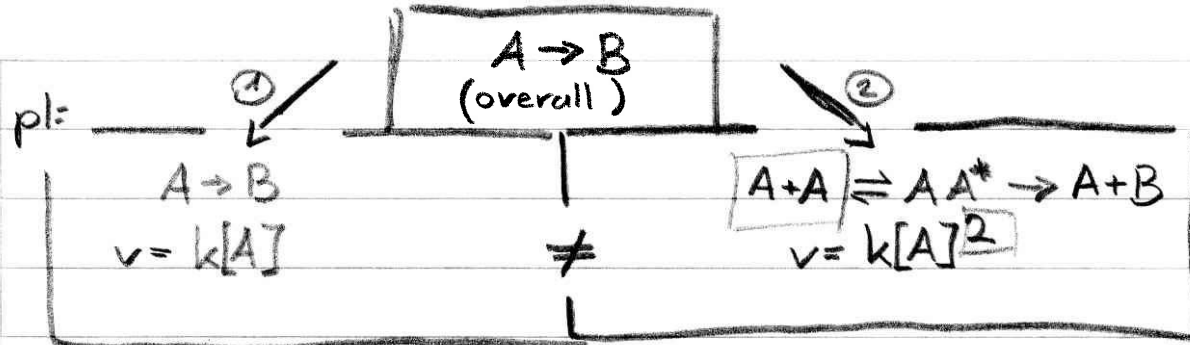
$\Rightarrow$ bruttó / overall reakció

$$k = k(T)$$

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

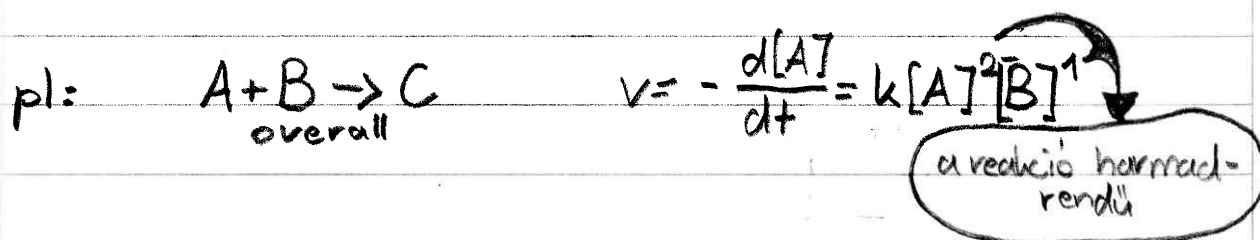
$\Rightarrow k$: sebességi állandó, T függvénye
 m : reakció rendszere

" k ", " m " kísérleti úton meghatározható,
mert:

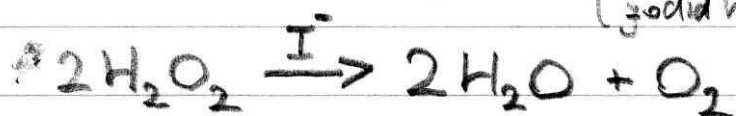


$\Rightarrow$ elemi reakció = amikormár nem lehet tovább bontani az egyenletet

itt meghatározható "k" és "m"



$\Rightarrow$ Hidrogén peroxid disszociációja:
(jódid katalizátor)



$v = \frac{1}{2} \left(-\frac{d[H_2O_2]}{dt} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{d[H_2O]}{dt} \right) = \left(\frac{d[O_2]}{dt} \right)$

$v = k[H_2O_2][I^-] \leftarrow$ hisérvletileg

$\Rightarrow$ elemi reakciók következnek:



$\rightarrow$ hipojódid ion: IO^- , átmeneti termék

$\rightarrow$ katalizátor részt vesz, de kezdeti állapotban kapjuk vissza

⇒ sebességi egyenletek:

$$\begin{cases} \textcircled{1} & v_1 = -\frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = k_1[\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-] \\ \textcircled{2} & v_2 = \frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = k_2[\text{H}_2\text{O}_2][\text{IO}^-] \end{cases}$$

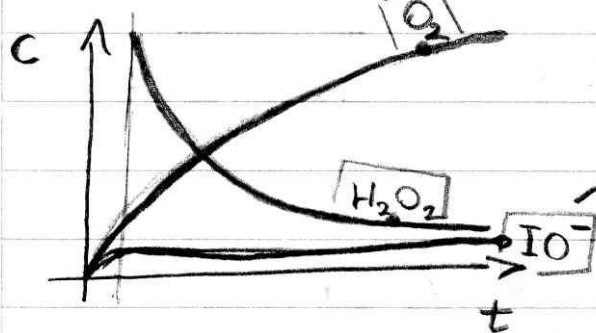
1. módszer feltételezés: $v_{\text{oa}} = v_1 = k_1[\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-]$
overall $\uparrow$

⇒ 1. reakció a sebességmeghatározó

$$v_{\text{oa}} = -\frac{1}{2} \frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} \neq -\frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = v_1$$

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

2. módszer steady state feltételezés
⇒ köztes termék koncentrációja nem változik



szerpel a reakcióban,
de nem változik c

$$\frac{d[\text{IO}^-]}{dt} = 0$$

⇒ ① reakció anny IO^- -t termel, amennyit ② fogyaszt ⇒ $v_1 = v_2$

$$k_1[\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-] = k_2[\text{H}_2\text{O}_2][\text{IO}^-]$$





$$k_1[I^-] = k_2[IO^-]$$

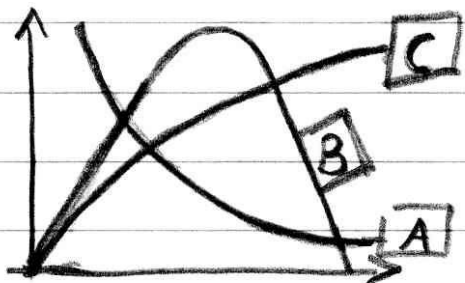
$$\frac{k_1}{k_2}[I^-] = [IO^-]$$



$$v_2 = \frac{d[O_2]}{dt} = k_2[H_2O_2] \frac{k_1}{k_2}[I^-] = k_1[H_2O_2][I^-] = v_1$$

$$\underline{\underline{v_{\infty} = v_1 + v_2 = 2v_1}}$$

➔ konsekutív reakció (egymást követő)



$$v = k[A][B]$$



$$v = k(T)[A]^m[B]^n$$

A-ra nézve
másodrendű!

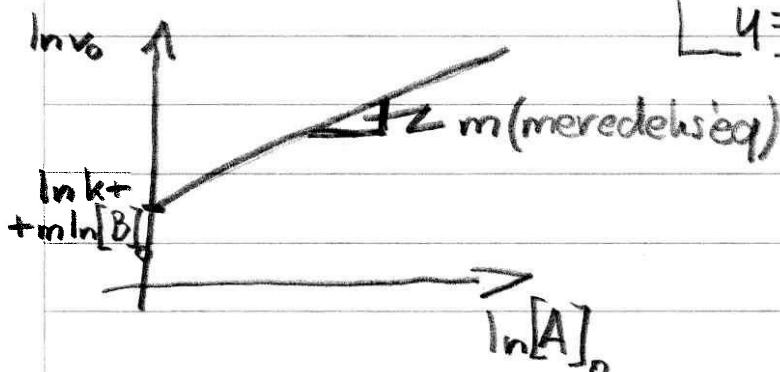
$$\boxed{m=2}$$

	[A] ₀	[B] ₀	v ₀
mért	mmol	mmol	mmol/sec
①	1	5	0,001
②	5	5	0,025
③	10	5	0,1

➔ linearizáljuk a "grafikont" ⇒ logaritmus

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

$$\boxed{y = ax + b = \text{egyenes e.}}$$



➔ Enzimek = BioKatalizátorok (fehérjék)

→ hívhatunk egy gyors reakciót

➔ szubsztrát = amit átalakítanak



➔ Michaelis-Menten egyenlet:

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

K_m : Michaelis állandó

$$[S] \ll K_m$$

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

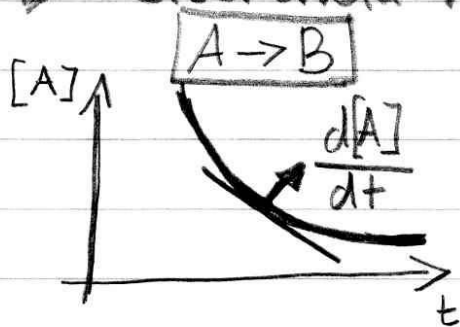
$$[S] \gg K_m$$

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

▶ kezdeti sebességet mérünk ▶

→ kezdeti koncentráció pontos
→ termék gátolhatja a reakciót

➔ elsőrendű reakció (pl. radioaktív bomlás)



$$m = \frac{d[A]}{dt} = \text{meredekség}$$

→ pillanatnyi időbeli változás

$$c = f(t) \leftrightarrow y = f(x)$$

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

$$\frac{d[A]}{[A]} = -k dt \Rightarrow \int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = -k \int_0^t dt$$

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

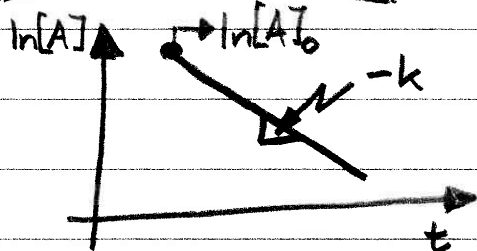
1. rendű reakció
alapegyenlete

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

$$\ln[A] - \ln[A]_0 = -kt$$

➔ radioaktív bomlásnál: $k = \lambda$ bomlási állandó
 $\tau = \frac{1}{k}$ { relaxációs idő
 { reakció életideje
 ($k = \frac{1}{\tau} \leftrightarrow \tau = \frac{1}{k}$)

$$[A] = [A]_0 e^{\left(\frac{-t}{\tau}\right)}$$



$$\ln[A] = -kt + \ln[A]_0$$

$y = ax + b$

➔ $n = n_0 e^{\left(\frac{-t}{\tau}\right)}$

⇒ ha $t = \tau$

$$n = n_0 e^{-1} = \frac{n_0}{2,718}$$

n : atomok száma
 τ : amennyi idő alatt e -ed
 részére (2,718-adára)
 csökken a mennyiség

➔ $\frac{n_0}{2} = n_0 e^{\left(\frac{-\tau_{1/2}}{\tau}\right)}$

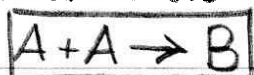
$$2 = e^{\left(\frac{\tau_{1/2}}{\tau}\right)}$$

$$\ln 2 = \tau_{1/2} / \tau$$

$\tau_{1/2}$: felezési idő
 amennyi idő alatt
 kezdeti mennyiség
 1/2-ére csökken

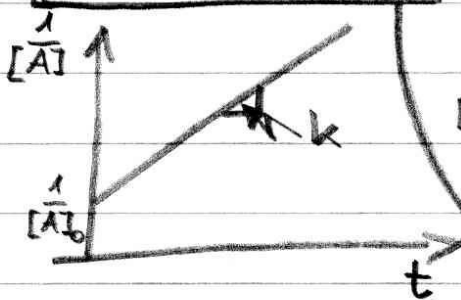
$$\tau_{1/2} = 0,693 \tau$$

➔ másodrendű reakciók



integrált seb. e.

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



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

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

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]^2} = k \int_0^t dt$$

$$\left[\frac{1}{[A]} \right]_{[A]_0}^{[A]} = -kt$$

➔ DNS renaturációja

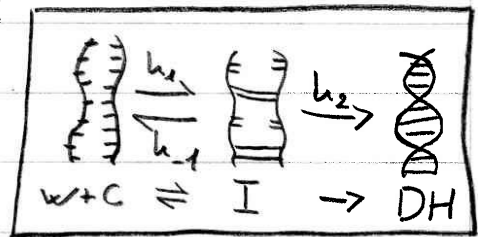
- ➔ DNS két szálra (Watson & Crick, feltedezői) hő hatására szétválik (95°C-on disszociál)
- ➔ feldarabolják (nagy nyomással kis résen átpréselik, szétválik 300 db-os darabokra)
- ➔ ha visszahűtik 5°C-al, akkor a jól illeszkedő darabok már összedőlnek

[DH] kettős spirál koncentrációja

[W] Watson lánc —||—

[C] Crick lánc —||—

[I] átmeneti komplex —||—



$$K = \frac{k_1}{k_{-1}} = \frac{[I]}{[W][C]} \Rightarrow [I] = K[W][C] \quad ①$$

② [W] = [C] → így indulunk

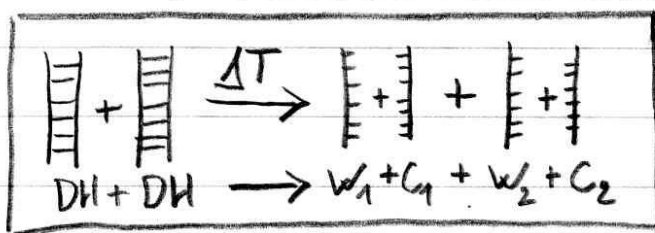
$$\frac{d[DH]}{dt} = k_2[I] = k_2 \underbrace{K[W][C]}_{①} = k_2 \underbrace{K[C]^2}_{②}$$

$$\frac{-1}{2} \frac{d[C]}{dt} = k_2 K[C]^2 \xrightarrow{\cdot 2} \underbrace{-\frac{d[C]}{dt}}_k = \underbrace{2k_2 K}_{k} [C]^2$$

$$-\frac{d[C]}{dt} = k[C]^2 \leftarrow \text{másodrendű reakció}$$

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

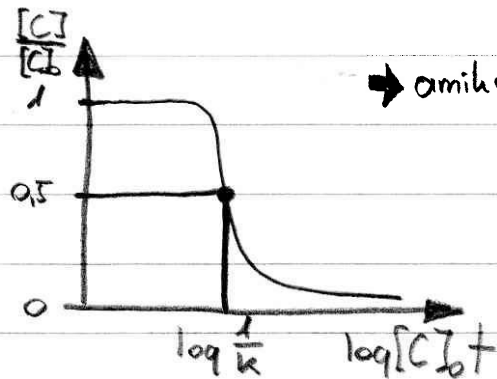
➔ bonyolultabb disszociáció =



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

$$\frac{[C]_0}{[C]} = k[C]_0 t + 1$$

$$\frac{[C]}{[C]_0} = \frac{1}{1 + k[C]_0 t}$$



→ amikor $\frac{[C]}{[C]_0} = \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2} = \frac{1}{1 + k[C]_0 t_{1/2}}$

$$2 = 1 + k[C]_0 t_{1/2}$$

$$k[C]_0 t_{1/2} = 1$$

$$\log [C]_0 t_{1/2} = \log \frac{1}{k}$$

($h = 2k_2K$)

→ Házi feladat & megoldás:

Feladatok
hőv. old.

①

móltört: $X_i = \frac{n_i}{\sum n_k}$

molalitás: $[m] = \text{mól/kg}$

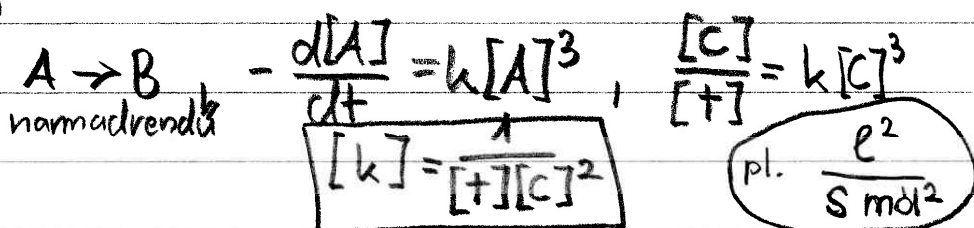
molaritás: $[M] = \text{mól/l}$ (hőmérséklettől függ)

tömegszázalék: 100 g oldatban ? g

térfogatszázalék: $\left(\frac{V}{V}\right)$

vegyesszázalék: $\left(\frac{m}{V}\right)$

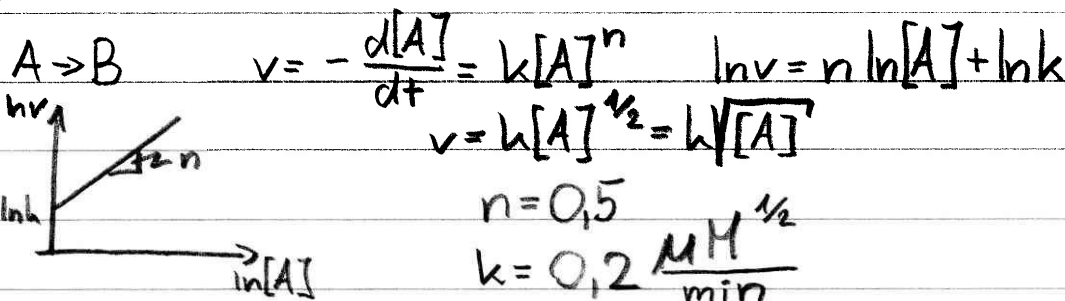
②



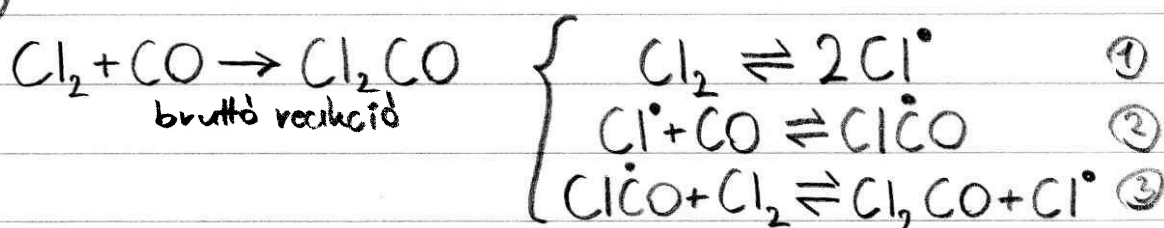
③

$t_{1/2} = 1 \text{ év}, \quad T = \frac{t_{1/2}}{\ln 2}, \quad \lambda = \frac{1}{T} = \ln 2 \frac{1}{\text{év}}$

④



⑤



②-③: gyökös láncreakció

1.) Definiálja a következő koncentráció egységeket:

móltört (mólfrakció) (X)
 molalitás (m)
 molaritás (M)
 tömegszázalék (w/w%)
 térfogatszázalék (v/v%)
 vegyesszázalék (w/v %)

2.) Mi a dimenziója (mértékegysége) a reakciósebességi állandónak harmadrendű reakció esetén?

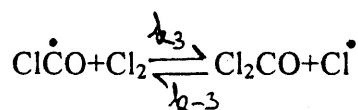
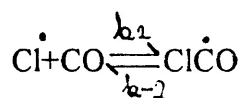
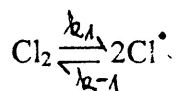
3.) Egy radioaktív izotóp felezési ideje 1 év. Mennyi a radioaktív bomlás bomlási állandója (λ) és a relaxációs ideje (τ)?

4.) Kísérletben mérjük az $A \rightarrow B$ reakció sebességét A koncentrációjának függvényében.

[A] μM	v $\mu\text{M}/\text{min}$
100	2,00
90	1,90
80	1,79
70	1,67

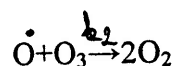
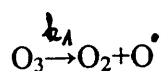
Grafikusan határozza meg a reakció rendűségét és határozza meg a sebességi állandó (k) értékét is.

5.) A $\text{Cl}_2 + \text{CO} \rightarrow \text{Cl}_2\text{CO}$ bruttó reakció a következő elemi lépésekre bontható:



Mutassuk meg, hogy a reakciósebesség $v = k_2 K_1^{1/2} [\text{Cl}_2]^{1/2} [\text{CO}]$ kifejezéssel adható meg, ha a második elemi reakció a sebességmeghatározó lépés és az első elemi reakció egyensúlyi állapotot ér el (K)!

6.) Az ózon bomlásának ($2\text{O}_3 \rightarrow 3\text{O}_2$) javasolt reakciómechanizmusa a következő:



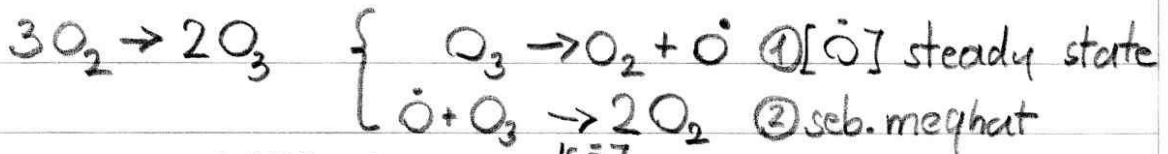
Határozzuk meg a reakció sebességi egyenletét arra az esetre, ha az $\text{O}^\bullet$ atom koncentrációjára alkalmazható a steady-state közelítés és a második elemi reakció a sebességmeghatározó lépés.

$$K_1 = \frac{[Cl^\cdot]^2}{[Cl_2]} = \frac{k_1}{k_{-1}}$$

$$v_{oa} = v_2 \quad k_2 [Cl^\cdot] [CO]$$

$$[Cl^\cdot] = K_1^{0.5} [Cl_2]^{0.5} \rightarrow v_{oa} = k_2 K_1^{0.5} [Cl_2]^{0.5} [CO]$$

⑥



$$v_{oa} = v_2 = k_2 [\dot{O}] [O_3]$$

$$\frac{d[\dot{O}]}{dt} = 0$$

$$k_1 [O_3] - k_2 [\dot{O}] [O_3] = 0 \quad \text{steady state}$$

$$v_{oa} = k_1 [O_3]$$

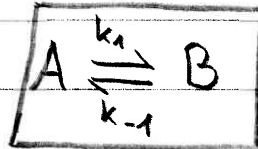
$$v_{oa} = v_1 = v_2$$

- 7.) Számítsa ki, hogy egy kémiai reakció sebessége hányszorosára nő enzim (katalizátor) hatására 37°C hőmérsékleten, ha az enzim a reakció aktiválási energiáját 15 kcal/mól értékről 10 kcal/mól értékre csökkenti.

Nem oldottuk meg...

- 8.) Egy reakció sebessége 10-szeresére nő, ha a hőmérséklet 30°C-ról 37°C-ra emelkedik. Számítsa ki a reakció aktiválási energiáját.

➡ Gyorskinetika



➔ Probléma: nincs sok időnk lemérni "k" - t

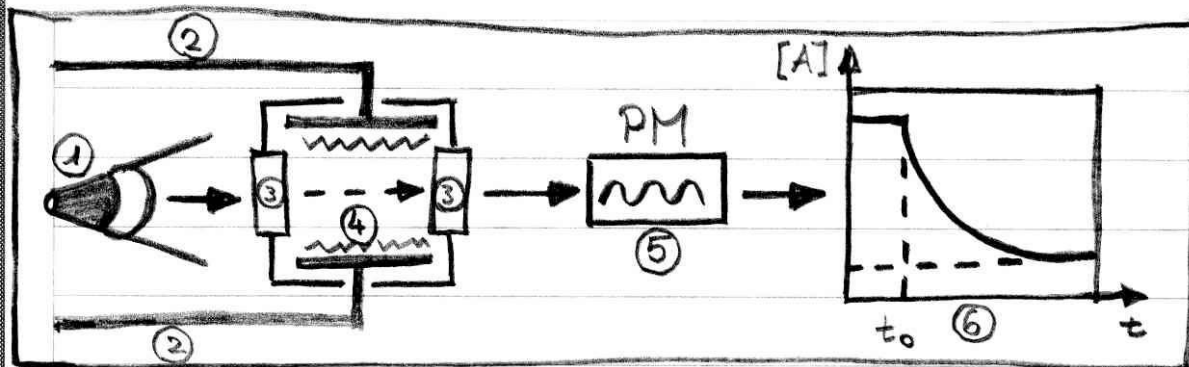
➔ Megoldás: #1: stopped flow: két nagynyomású fecskendővel hűdli egymás felé a két anyagot

#2

hőmérséklet ugrás = $\frac{k_1}{k_{-1}} = K = f(T)$
egyensúlyt megvárja, majd hirtelen megváltoztatja hőmérsékletet



Gyakorlat = a két különböző vegyület más-más nyeli el a fényt, elektrodokon árammal hirtelen hőmérséklet változás



- ① lámpa
- ② fém elektród
- ③ kvarcablak
- ④ reakció edény
- ⑤ Photo Multiplier (PM)
- ⑥ oszcilloszkóp

Kisülés=

$\Delta T \approx 10^\circ\text{C}$

$\Delta t \approx 1 \mu\text{sec}$

➔ $[A]$ és $[B]$ nem változik, csak K
 (τ) relaxációs idő leolvasható oszcilloszkópról

$$-\frac{d[A]}{dt} = k_1[A] - k_{-1}[B] \quad \& \quad [A]_\infty < [A]_0 \text{ (feltétel)}$$

($[A]$ csökken)

$$\begin{cases} X \triangleq [A] - [A]_\infty \\ X \triangleq [B]_\infty - [B] \end{cases} \quad \frac{dX}{dt} = \frac{d[A]}{dt} = \cancel{\neq}$$

$$-\frac{dX}{dt} = k_1[X + [A]_\infty] - k_{-1}[[B]_\infty - X]$$

⇒ az új egyensúlyban: $-\frac{d[A]}{dt} = -\frac{dX}{dt} = \cancel{\neq} 0 = k_1[A]_\infty - k_{-1}[B]_\infty$

$$\frac{dX}{dt} = -(k_1 + k_{-1})X \Rightarrow \frac{dx}{x} = -(k_1 + k_{-1})dt \quad \text{integrálom}$$

elsőrendű reakció ↓ $[\ln x]_x^x = -(k_1 + k_{-1})t$

$$X = X_0 e^{[-t \cdot (k_1 + k_{-1})]} \Leftrightarrow X = X_0 e^{(-t/\tau)}$$

$$\tau = \frac{1}{k_1 + k_{-1}}$$

$$K_{eq} = \frac{[B]_\infty}{[A]_\infty} = \frac{k_1}{k_{-1}}$$

➔ Reakció sebességi elv $A+B \xrightarrow{k} C$

➔ Arrhenius 1889-ben foglalkozott vele, hogy miért függ a reakciósebesség a hőmérséklettől $[K(T)]$

➔ híg gázokat vizsgált

➔ feltételezések: #1 = A-nak és B-nek találkoznia kell

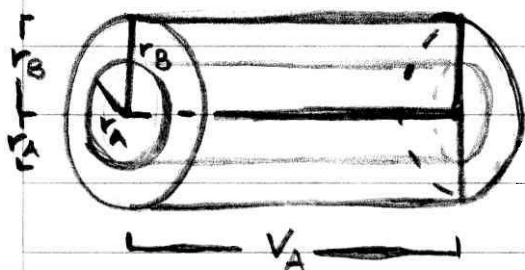
#2 = találkozás nem elegendő reakcióhoz, kell hozzá

Aktiválási energia

bizonyos mennyiségű E

#3 = bonyolultabb molekuláknál megfelelő orientáció is fontos (valószínűség)

① üthözések száma



feltétel: B nyugalomban
A mozog

➔ távolság / időegység

➔ V_A = A sűrűsége

térfogat: $V = \pi (r_A + r_B)^2 \cdot V_A$

B-t talál el: $\pi (r_A + r_B)^2 \cdot V_A \cdot [B]$

Üthözések száma

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

szimmetrikus A-ra és B-re

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

➔ 3 = szabadsági fokok száma

➔ k_B = Boltzmann állandó

$$1,38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$$

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

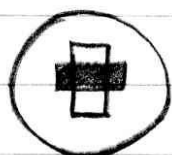
$$v_{rel} = \sqrt{\frac{8}{\pi} \frac{k_B T}{\mu}}$$

➔ μ = redukált tömeg = $\frac{m_A \cdot m_B}{m_A + m_B}$

⇒ Tehát ha A és B is mozog:

$$Z = \pi (v_A + v_B)^2 \left(\frac{8k_B T}{\pi \mu} \right)^{0.5} [A][B]$$

② Orientáció (valószínűség):



rossz



jó

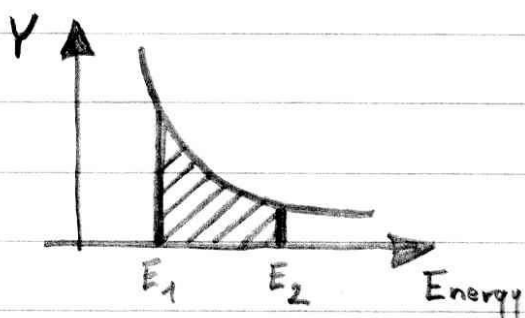
□: ahogy állnia kéne

→ P, irányadó szám

→ általában $0,1 \leq P \leq 1$

jó ütközések = $A = ZP$

③ Aktiválási Energia

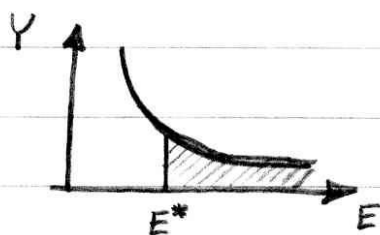


→ Maxwell eloszlás

→ exponenciális

$$\int_{E_1}^{E_2} Y dE = \frac{n(E_2) - n(E_1)}{N}$$

⇒ Maxwell megmutatta: $Y = \frac{1}{RT} \cdot e^{\left(-\frac{E}{RT}\right)}$



→ E^* = aktiválási Energia
(küszöbérték)

$$\int_{E^*}^{E_{\infty}} \frac{1}{RT} e^{\left(-\frac{E}{RT}\right)} dE = \left[-e^{-\frac{E}{RT}} \right]_{E^*}^{\infty} = e^{\left(-\frac{E^*}{RT}\right)}$$

⇒ A reakció sebessége:

$$v = \underbrace{\pi \cdot (v_A + v_B)^2 \cdot \left(\frac{8k_B T}{\pi \mu} \right)^{0.5} \cdot P}_{k} \cdot e^{\left(-\frac{E^*}{RT}\right)} \cdot [A] \cdot [B]$$

⇒ Arrhenius egyenlet:

$$k = A \cdot e^{\left(-\frac{E^*}{RT}\right)}$$

→ definiál egy új állandót

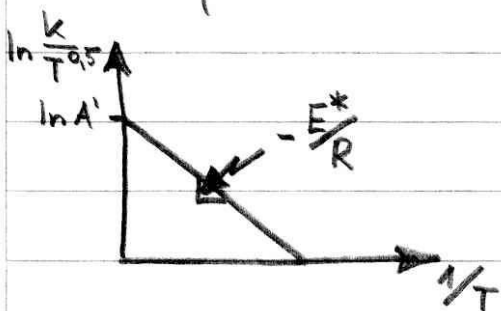
⇒ A függ a hőmérséklettől (gyökösen)
 $A = A' T^{0.5}$ (hőmérsékletet kiemeli)

$$A' = \pi \cdot (r_A + r_B)^2 \cdot \left(\frac{8k}{\pi \mu} \right)^{0.5} P$$

$$\frac{k}{T^{0.5}} = A' e^{(-E^*/RT)}$$

⇒ nem függ hőmérséklettől

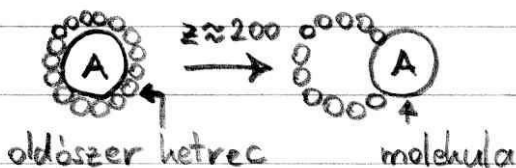
→ sebességi állandó hőmérséklet függéséből megmondható az aktiválási Energia



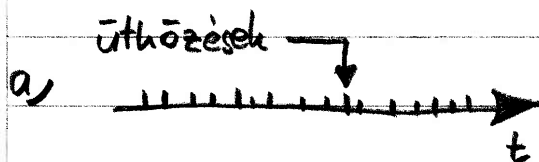
→ Arrhenius ábrázolás

→ E^* ; P

⇒ Reakciók oldatokban



→ mielőtt A molekula kiszabadul $\approx 200 \times$ üthözik oldószer molekuláival



→ gázokban üthözések véletlenszerűen



→ oldatokban üthözési csomagok

⇒ hosszú időre nézve üthözések száma azonban megegyezik!

① E^* nagy (10^6 üthözésből 1 jó) → $|a_1| = |b_1|$

② E^* kicsi (10 üthözésből 1 jó)

→ nem az üthözések száma, hanem találkozások számításának (diffúzió kontrollált folyamat)

töltetlen részecshere levezetve:

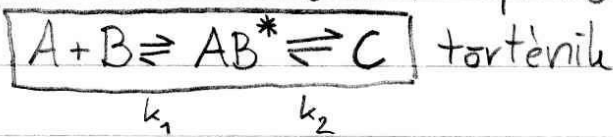
$$k = \frac{4\pi N_A}{1000} (D_A + D_B)(r_A + r_B)$$

→ $N_A = 1$ mólból hány részecske
 → D_A, D_B diffúziós állandók
 → $10^9 \text{ mol}^{-1} \text{ sec}^{-1} \leq D \leq 10^{11}$

➔ Aktívált komplex $A+B \rightleftharpoons C$

⇒ 1935 Eyring: $A+B \rightleftharpoons C$ esetén igazából:

AB^* = aktívált komplex



történik

➔ minden reakcióban van aktívált komplex (intermedier)

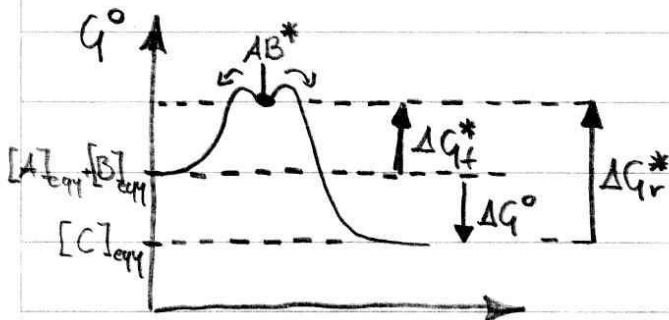
⇒ TFH " k_2 " sebességmeghatározó kvázi egyensúly (látszólagos egyensúly)

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

$$\Delta G_{\ddagger}^* = -RT \ln K_{eq}^* \Rightarrow K_{eq}^* = e^{(-\Delta G_{\ddagger}^*/RT)}$$

$$\frac{[AB^*]_{eqy}}{[A]_{eqy} [B]_{eqy}} = e^{(-\frac{\Delta G_{\ddagger}^*}{RT})} \Rightarrow [AB^*]_{eqy} = [A]_{eqy} [B]_{eqy} e^{(-\frac{\Delta G_{\ddagger}^*}{RT})}$$

*: Van kvázi egyensúly, standard állapot ▼



Eyring diagram

$$\Delta G^\circ = \Delta G_{\ddagger}^* - \Delta G_r^*$$

⇒ hogy AB^* állapotból kilendüljön, kell minimális energia (pl. molekulák rezgése)

$$E = h\nu \Rightarrow k_B T = h\nu$$

$$\nu = \frac{k_B T}{h}$$

➔ h : Planck féle állandó $6,616 \cdot 10^{-34}$ Js

➔ ν : frekvencia

$$\Rightarrow \text{Eyring} : k_2 = \nu = \frac{k_B T}{h}$$

$$\left(\frac{d[C]}{dt}\right)_f = k_2 [AB^*]_{eqy} = \frac{k_B T}{h} [AB^*]_{eqy}$$

$$\left(\frac{d[C]}{dt}\right)_f = \underbrace{\frac{k_B T}{h} \cdot e^{-(\Delta G^\ddagger / RT)}}_{k_f} \cdot [A]_{eqy} \cdot [B]_{eqy}$$

$$\Rightarrow \Delta G_f^\ddagger = -RT \ln \left(\frac{h \cdot k_f}{k_B T} \right)$$

$$\Rightarrow \Delta G^\ddagger = \Delta H^\ddagger - T \Delta S^\ddagger$$

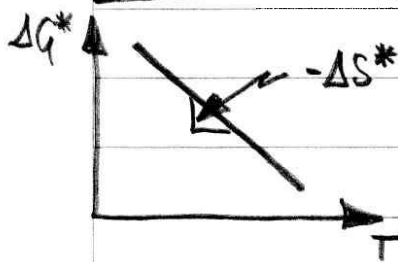
termodinamika II. főtétele

$\rightarrow$ szabadenergia: kinyerhető E a rendszerből (max) (ΔG)

$\rightarrow$ entalpia: rendszer saját belső energiája (ΔH)

$\rightarrow$ entrópia: rendszer rendezetlenségének mértéke (ΔS)

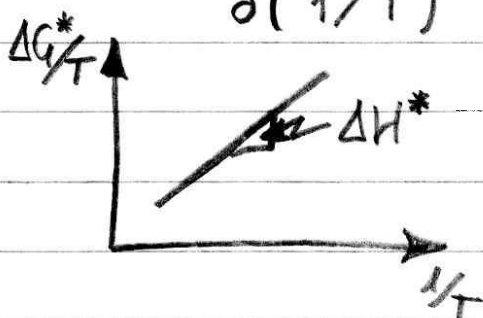
$$\frac{\partial(\Delta G^\ddagger)}{\partial T} = -\Delta S^\ddagger$$



$\Rightarrow$ Van't Hoff egyenlet

$$\Delta G^\ddagger = \Delta H^\ddagger - T \Delta S^\ddagger \rightarrow \frac{\Delta G^\ddagger}{T} = \frac{\Delta H^\ddagger}{T} - \Delta S^\ddagger$$

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



$\rightarrow$ Van't Hoff ábrázolás

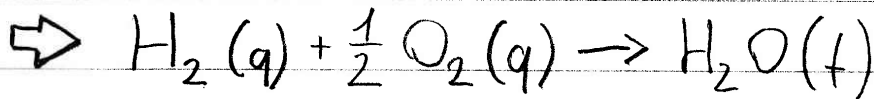
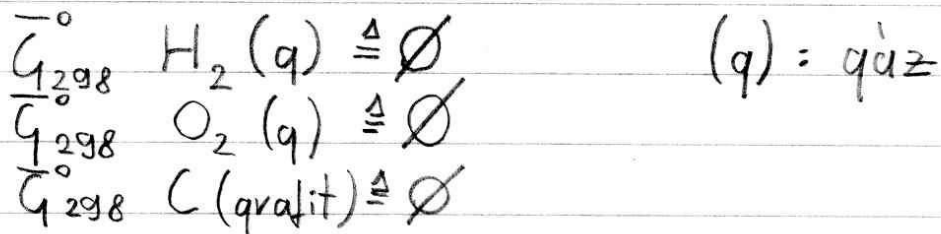
➔ Oldatok termodinamikája

- ➔ szabadenergia hajt minden folyamatot
- ➔ nehezen mérhető (relatív)
- ➔ E különbséget mérni érdemes két állapot között

$$\Delta G = G_{\text{végállapot}} - G_{\text{kezdeti}}$$

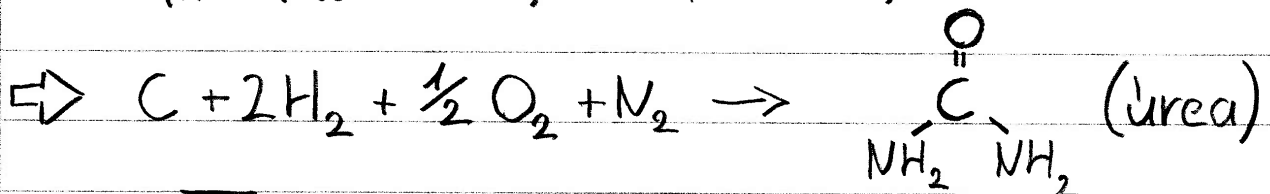
➔ hi kell jelölni egy $\emptyset$ pontot

$\overline{G}_{298^\circ, 1\text{ATM}}^\circ$: standard állapot, molos koncentráció



$$\Delta G_k = \overline{G}_{298}^\circ \text{ H}_2\text{O}(\text{l}) - \underbrace{\overline{G}_{298}^\circ \text{ H}_2(\text{g})}_{\emptyset} - \underbrace{\frac{1}{2} \overline{G}_{298}^\circ \text{ O}_2(\text{g})}_{\emptyset}$$

$$\Delta G_k = \overline{G}_{298}^\circ \text{ H}_2\text{O}(\text{l}) = -56,69 \text{ kcal/mol}$$



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

➔ poláros

➔ vízben jól oldódik,
de melegszik is

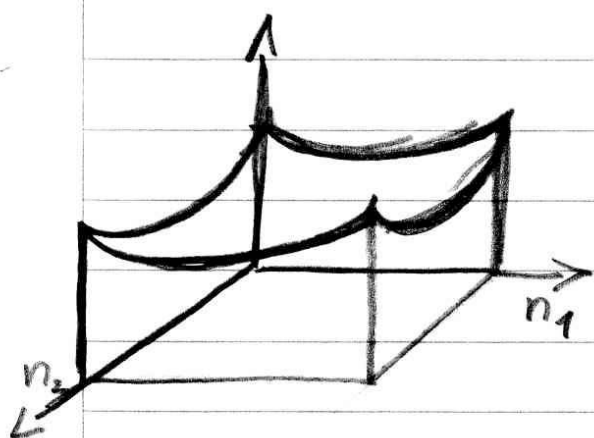
⇒ víz és urea oldat

- nem tudjuk oldószert v. oldott anyag szabad E -jét mérni
- rendszer szabad E -változását már mérhetjük, ha komponent adunk hozzá

$$\Delta G = \left(\frac{\partial G}{\partial n_1} \right)_{T, P, n_2} \cdot dn_1 \quad \Rightarrow \text{vizet hozzá } (n_1 = \text{viz mól})$$

$$\Delta G = \left(\frac{\partial G}{\partial n_2} \right)_{T, P, n_1} \cdot dn_2 \quad \Rightarrow \text{ureát hozzá}$$

$$\mu_1 = \left. \frac{\partial G}{\partial n_1} \right|_{T, P, n_2} \quad \Rightarrow \text{kémiai potenciál}$$



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

I. főtétel: $dE = dQ + dW$; II. főtétel: A spontán folyamatok irányáról: $\Delta S_R + \Delta S_K \geq 0$;

Az élő szervezet zárt rendszer, csökkentheti az entrópiáját, de a környezet entrópiája nagyobb mértékben nő. Az entalpia a hőtartalommal függ össze. Az I. és II. főtétel kombinálható:

$$dE = TdS - pdV$$

$$dH = dE + d(pV) = dE + pdV + Vdp \quad \text{Reverzibilis esetben: } dH = TdS + Vdp; \text{ Gibbs-féle}$$

szabadenergia: $\Delta G = \Delta H - TS$; standard Gibbs-féle

$$\text{szabadenergia: } \Delta G^0 = -RT \ln K_{\text{egy}} = -RT \ln \frac{[B]_{\text{egy}}}{[A]_{\text{egy}}} \quad \Delta G = \Delta G^0 + RT \ln \frac{[B]}{[A]}$$

Egyensúlyban: $\Delta G = 0$ ezért $\Delta G^0 = -RT \ln K$!

$\frac{[B]}{[A]} = K \Rightarrow \Delta G = 0 \quad A \rightleftharpoons B$
$\frac{[B]}{[A]} < K \Rightarrow \Delta G < 0 \quad A \rightarrow B$
$\frac{[B]}{[A]} > K \Rightarrow \Delta G > 0 \quad A \leftarrow B$

A reakciósebesség az A anyagra nézve: $v_1 := \frac{-d[A]}{dt}$

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k[A]^m; \quad k := \text{reakciósebességi állandó, együttható (T-től függ); } m := \text{a reakció}$$

rendűsége (első, másod, harmad, vagy tört is lehet); k meghatározása: kísérlettel

$$\text{mértékegységek: } [v] = 1 \frac{M}{s}; \text{ elsőrendű reakció: } [k] = \frac{1}{s}; \text{ másodrendű reakció: } [k] = \frac{1}{Ms};$$

elemi reakciók esetén a rendűség = sztöchiometria

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k(t)[A]^m[B]^n$$

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

$$\text{relaxációs idő, élettido: } \tau = \frac{1}{k}$$

Arrhenius-elmélet: $A+B \rightarrow C$ esetén $v=k(t)[A]^m[B]^n$; Ütközés (a reakciósebesség az ütközések gyakoriságától függ: $Z(\frac{\text{ütközés}}{\text{idő}})$); Az ütközés gyakorisága a molekulák koncentrációjától

függ; molekulák megfelelő orientációban találkoznak; Megfelelő energia

$$\text{Reakciósebesség: } k = A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT}}$$

Kérdés: Hogyan változtatja meg az oldószer jelenléte a reakciósebességet?

Statistikus módszerekkel meghatározható, hogy az oldószer csak az ütközések eloszlását befolyásolja, az ütközések számát nem!

- 1) Kis valószínűségű reakció (E_A nagy) $\sim 10^6$ ütközés/reakció
nincs hatással az oldószer jelenléte a reakciósebességre

2) Nagy valószínűségű reakció (E_A kicsi) ~ 10 ütközés/reakció
 az a fontos, hogy hányszor találkoznak (encounter=találkozás)
 D := a diffúziós állandó (milyen gyorsan tud mozogni folyadékban)

$$\Phi_{AB} = \frac{Z_A Z_B e^2}{\varepsilon(r_A + r_B) k_B T}$$

Z := töltések száma, k_B :=Boltzmann állandó, ε :=dielektromos állandó (~hogyan árnyékol),
 e :=elemi töltés

Minden jelenséget valamilyen potenciál hajt.

Gibbs-féle szabadenergia

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

ΔG := a maximális energia, amit a reakcióból ki tudunk nyerni (Egy rész elvész: $T\Delta S$)

$$(G = H - TS)$$

Csak különbséget tudunk mérni, ezért felvesszünk egy viszonyítási alapot:

$$\overline{G}_{298,1 \text{ atm}}^0 \quad ({}^0 := \text{egységnyi, nem feltétlenül egy mól, ha egy mól, akkor van felülvonás})$$

Kémiai potenciál

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

$$\left(\frac{\partial G}{\partial n_1} \right)_{T, p, n_2} = \mu_1 := \text{kémiai potenciál (csak az összetételtől függ, nem függ az}$$

anyagmennyiségtől);;

$$dG = \mu_1 dn_1 + \mu_2 dn_2; dG \text{ függ az anyagmennyiségtől}$$

Additivitási törvény:

$$\delta G = \mu_1 dn_1 + \mu_2 dn_2$$

Végezzük el milliószor és adjuk össze (az arány ugyanaz):

$$G = \mu_1 n_1 + \mu_2 n_2 \quad (G \text{ a rendszer összes szabadenergiája})$$

$$\text{Gibbs-Duhem egyenlet: } 0 = n_1 d\mu_1 + n_2 d\mu_2$$

Raoult-törvény: $\mu_1 = \mu_1^0 + RT \ln X_1$ ($X_1 \approx 1$, $X_2 \approx 0$ esetén, azaz híg oldatokban)

$$\mu_2 = \mu_2^0 + RT \ln X_2 \quad (\text{szintén híg oldatokra, mert a Raoult-törvényből származik})$$

nem tudunk olyan oldatot készíteni, ahol: $n_2 \gg n_1$

Mi számít híg oldatnak? nem ionizált (pl. glükóz): 0,01-0,1M ionizáló oldatok (pl. NaOH):

0,001M fahéjék: 10^{-6} - 10^{-5} M;;; Minden rendszer egyensúly esetén egy nem töltött anyag

kémiai potenciálja azonos minden fázisban, amennyiben ez az anyag a fázisok közt szabadon

$$\text{áramolhat; } X_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} = \frac{c_2}{c_1 + c_2} ;;;$$

$$\text{Új fizikai mennyiség: a (aktivitás) } \mu(\text{reális}) = \mu^\circ(\text{ideális}) + RT \ln a$$

$$\text{Nagy hígításnál: } \mu_2(\text{reális}) = \mu_2(\text{ideális}), \text{ azaz } \lim_{c_2 \rightarrow 0} a_2 = c_2$$

aktivitási koeficiens γ (de ez is függ a koncentrációtól) $a_2 = \gamma_2 c_2$

az eltérés (ideális-reális): $RT \ln \gamma_2$

;;;;

Sejtek, szövetek, membránok, organellek

prokarióta: DNS cirkuláris, nincs sejtváz, 3,5 md éve alakultak ki; eukarióta: sok DNS

másolat (hisztonokkal alkot komplexet: kromoszóma) (hisztonok: bázikus fehérje),

mikrotubulusok, mikrofilamentumok, 1,5 md éve, endocitózis-elmélet;;; Szövetek: közös

funkciójú sejtek; állatoknál 4 típus- epitélium: test és üregek felszíne, rétegekből áll,

lapos/oszlopos sejtek, lehet tagolt: pl. bél (nagyobb felszín), csillók boríthatják (egy irányban mozognak);; kötőszövet: pl. csont, porc, zsír, vér, tarószerep
sok víz, sok só, sok oxigén, szén-dioxid van oldva, nagy térfogat, kevés sejt
sejtközi mátrix vizet tud megkötni (protoglikánok), fonális v. amorf szerkezetű
kollagén: fonális, jó vízmegkötő fehérje, tartást biztosít, A szervezet összes fehérjéjének 1/3-a
kollagén Két sejt típus: a) fibroblasztok: szintetizálják a fehérjéket és a mátrix elemeit b)
makrofágok: káros/idegen anyagok eltávolítása és ellenanyagok (immunglobulinok)
szintetizálása;; idegszövet: agy, gerincvelő, idegek, módosult hámsejt Két sejt típus a) idegsejt:
b) gliasejt: a mielin szintetizálják;; izomszövet: a) sima: vegetatív mozgás, b) harántcsíkos
(váz- és szívmusculus), 1 sejt – több sejtmag, rostokba rendeződnek (100-1000 sejtmag);;
sejtkapcsolatok: szoros: epithelium, adhéziós: epithelium, réskapcsolat: csatornák kapcsolják
össze a sejteket;;

Heterogén rendszer: több komponens, több fázis, zárt rendszer; Áll.: heterogén rendszerben a
kémiai potenciál értéke minden fázisban azonos

$$\mu_{1A}^0(p + \pi) - \mu_{1B}^0(p) = -RT \ln X_{1A} - RT \ln \gamma_{1A}$$

Viriál-közelítés: $\frac{\pi}{\omega_2} = RT \left(\frac{1}{M_2} + B_2 \omega_2 + \dots \right)$, ahol $1/M_2$: az első viriál-együttható, B_2 : a

második viriál-együttható (ami megmutatja, hogy milyen mértékben térünk el az ideálistól);;
 $B_2 > 0$: a részecskék taszítják egymást (pl. fehérjék) (nem aggregálódnak); $B_2 < 0$: a részecskék
vonzák egymást $\rightarrow$ pontatlan lesz a mérés, mert összetapadhatnak; $B_2 = 0$: ideális rendszer;;

Aktív transzport: energia szükséges; Passzív transzport: egyensúly irányába mutat

(valamilyen potenciál hajt, kémiai/elektromos) $\pi = \frac{RT \omega_2}{M_2} - \frac{RT}{V_1} \ln \gamma_1$

Elektromos potenciál: $\Phi > 0$ munkát végzünk; $\Phi < 0$ munkát nyerünk; Egysége: J/C=V

Munka: $w = z N_A e \Delta \Phi = z F \Delta \Phi$, ahol F : Faraday-állandó ($F = 96478$ C/mol)

Egyéni pozitív töltést Φ_B helyről Φ_A helyre viszünk:

$\Delta \Phi = \Phi_B - \Phi_A \approx 360$ mV (ez tartja vissza a többi iont); Donnan-potenciál: $\Delta \Phi = -\frac{RT}{zF} \ln \frac{b}{a+b}$,

ahol $a = [P^-]$ és $b = [NaCl]$; Debye-Hückel-elmélet: $\gamma_{\pm} \mu_{\pm}$ nehezen mérhető A DH-elmélet
lehetővé teszi, $\gamma_{\pm}$ kiszámítását (elektrolitokra) atomi paraméterekből. Feltételezi, hogy a

részecskék között Coulomb-természetű kölcsönhatások vannak. $\log \gamma_{\pm} = -0.51 |z_- z_+| I^{\frac{1}{2}}$

I : ionerősség $I \equiv \sum C_i z_i^2$ egyértékű ion esetén azonos a moláris koncentrációval; $\gamma_{\pm}$: Mekkora
energetikai kölcsönhatás van az ionok között az oldatban

Élő sejt $\rightarrow$ makromolekulák: kisebb egységek polimerizációjával jöttek létre, azaz
biopolimerek, Pl.: fehérjék (aminosavak, $M = 110$ g/mol) $M_{\text{fehérje}} = 5000-10^6$ g/mol;
nukleinsavak (nukleotidok) $M = 10^9$ g/mol (10^9 bázis van a DNS-ben 1 DNS=1 kromoszóma);
poliszacharidok (egyszerű cukrok) $M = 10^6$ g/mol; lipidek (glicerín + zsírsavak észterei) R_1-
 $OH + HOOC-R_2 \rightarrow H_2O + R_1-O-CO-R_2$

anyag	m/m%	hányféle az adott molekulacsoportból	
víz	70	1	
fehérje	15	3000	
DNS	1	1	cDNS, ami a sejtmembránhoz kötődik
RNS	6	>3000	
poliszacharid	3	5	van sejtfala, ami poliszacharid
lipidek	2	20	sejtmembrán
kis intermedierek, szerves ionok	3	500	

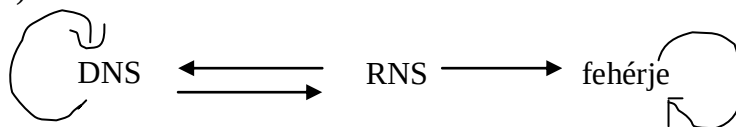
A DNS és a fehérjék információhordozó makromolekulák.

Hol tárolódik az info??? → 1) szekvenciában, ami fehérjékre fordítódik le

A fehérjék elsődleges szerkezete az aminosavszekvencia

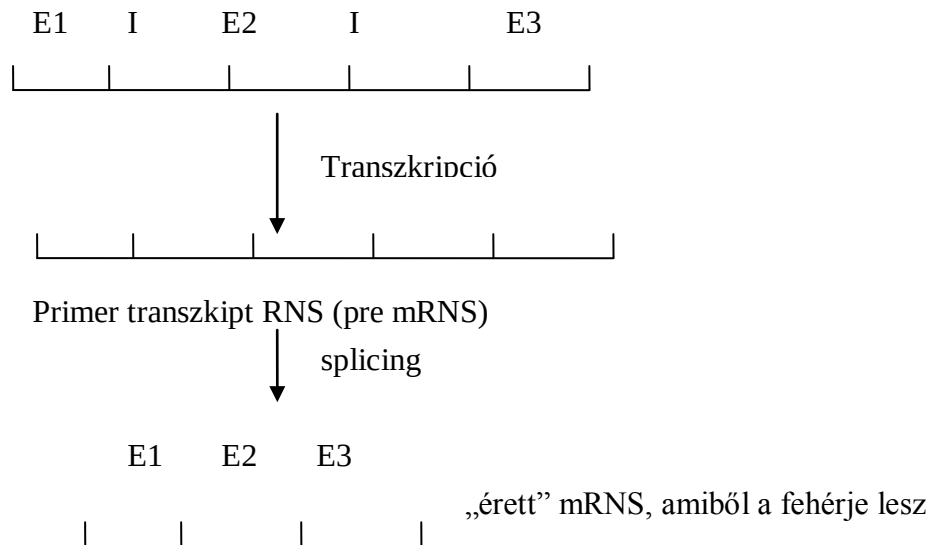
poliszacharidok: egy vagy két monomer polimerizációjával keletkezik

A molekulák központi dogmája: DNS → RNS → fehérje (az info kizárólag ebbe az irányba mehet)



Miért kell, hogy három formában jelenjen meg? Ugyanaz az információ, de más a molekulák biológiai szerepe; DNS → hosszútávú tárolás, stabil molekula; RNS → rövidtávú továbbítás, nagyon instabil (gyorsan bomlik); fehérje → élethez szükséges folyamatok biokatalizátorai (enzim);;

gén: - olyan faktor egy élőlényen belül, ami meghatároz bizonyos tulajdonságokat és öröklődik; Morgan kísérlete az ecetmuslincákkal → egyes gének milyen távol vannak egymástól; egy DNS szakasz, amely információt tárol; van olyan gén, ami csak RNS szinten jelenik meg;;; Egy DNS szakasz, amely egy fehérje vagy RNS szintéziséhez szükséges információkat tárolja;;; Genetika: génekkel foglalkozó tudomány (elavult);;; Genom: egy élőlény teljes genetikai anyaga, beleértve a nem kódoló DNS-t is;;; Genomika: genommal foglalkozó tud.;;; kromoszóma: magas szervezetségi fokú nukleoprotein (azaz a sejtmagban van) komplexek, amelyek a DNS tárolására szolgálnak (hisztionok);;; Van egy olyan apparátus, ami ki tudja „csomagolni”- topoizomeráz enzimek (ezek tekerik be és ki a DNS-t), Baktrérium: körkörös DNS → ez a baktérium „kromoszómája”;;; Az emberi kromoszóma lineáris: telomer-gének-centromer (itt van összekapcsolva, itt húzódik szét osztódáskor)- gének-telomer;; start kodon: ATG; stop kodon: TAA, TAG, TGA; Minden gén metioninnal kezdődik, de az első Met nem épül be a fehérjébe, gén → mRNS → fehérje;;; kolineáris információáramlás (azaz minden további nélkül le tudjuk fordítani);;; ember: 9 mrd bázispár, 40000 gén → az emberi genom 1-2%-a kódol fehérjét; A gének elszórtan helyezkednek el, köztük nem kódoló szakaszok vannak. A gének is fel vannak darabolva: exon: kódoló szakasz, intron: génen belüli nem kódoló szakasz;



splicing: spliceoszóma (RNS-fehérje komplex) A katalízis részben vagy egészben RNS által történik. (Az RNS bizonyos enzimatis funkciókat tud pl. splicing); self-splicing: az RNS képes saját magát felvágni és összerakni mRNS-é;; transzkripció:

$DNS \xrightarrow{DNS_dependens_RNS_polimeráz} RNS \rightarrow fehérje$;; reverz transzkripció: $RNS \rightarrow DNS$ (pl.

retrovírusok, azaz RNS vírusok pl AIDS létének első lépése);; Ilyen az élő sejtben nincs, de felhasználva vírusokat tudunk mRNS-ből (splicing után) DNS-t csinálni $\rightarrow$ copyDNS;;

Genomiális adatbázis: egyfajta lehet, benne vannak az intronok; cDNS adatbázis: tényleg a fehérjéket kódoló génszakaszokat jelenti, különböző sejtekben más-más fehérjék

expresszálódnak, szövetspecifikus, függ a körülményektől;; DNS replikáció: replikációs

origó: a DNS szál felnyílik és másolódni kezd; baktérium esetében egy ilyen pont van,

embernél egyszerre több helyen indul a másolás, A követő szál esetén kis szakaszok másolódnak, majd egy enzim összerakja DNS polimeráz csak a 3' véghez tud nukleotidot hozzáadni. $\rightarrow$ Kell egy indító, primer szakasz (ált. RNS). RNS-DNS kevert szállal indul, majd

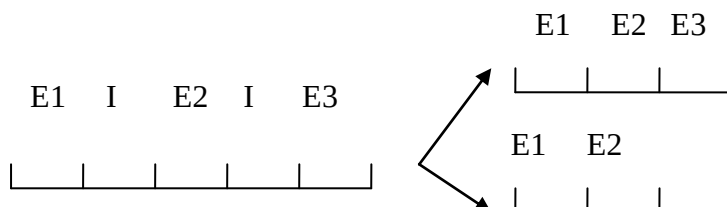
az RNS kicserélődik DNS-re. Minden osztódás után a kromoszóma rövidül, és bizonyos számú osztódás után az adathordozó struktúra is sérül.(rákos sejtek örökké tudnak osztódni $\rightarrow$ Nobel-díj);; Telomeráz enzim: kezdő RNS-t DNS-re cseréli (ez is egy reverz transzkriptáz enzim) Sokáig úgy gondolták, hogy a reverz transzkripció a vírusok sajátossága.

A telomeráz aktivitása testi sejtekben kicsi, sérüléskor megnő, ivarsejtekben és rákos

sejtekben nagy; 6 kodon, de nem ugyanakkora valószínűséggel használja mindet $\rightarrow$

kodonpreferencia (pl emberi gén nem lehet egy az egyben átrakni baktériumba úgy, hogy meg

is szólaljon);; Fehérjeszintézis: Az első egy módosított formil-metionin (Met-f), ez leválik a fehérjeszintézis után (transzláció) Következmény: 1génnek több fehérje felel meg;



gén + alternatív splicing + különböző poszttranszlációs módosítások $\rightarrow$ különböző fehérjék



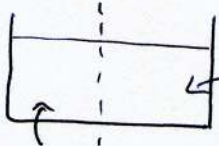
5 számolásos feladat

- kémiai pot.
- sztraintegráció (Arrhenius)
- oszmózisnyomás
- reakciókinetika

+ egyenlő tesztkérdések (pl fogalom)

lehet használni bõmit (körny, saját jegyet)

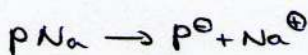
1. Ozmózisnyomás


 $10 \frac{\text{g}}{\text{L}} \text{ NaCl } (M_w = 58,44 \text{ Da}) \quad 58,44 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$

30 g elegendő oldat

 $(M_w = 64 \text{ kDa} = 64000 \frac{\text{g}}{\text{mol}})$

az egyensúly beállta után mekkora lesz az oszmózisnyomás és a potenciál?

 $\pi = ?$ $\Delta \phi = ?$ $T = 25^\circ\text{C}$ $R = 0,0821 \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{K} \cdot \text{mol}}$ 

$$\pi = R \cdot T \cdot c$$

$$(\text{fehérje konc.}) a = \frac{30 \frac{\text{g}}{\text{L}}}{64000 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 4,68 \cdot 10^{-4} \text{ M } \left[\frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]$$

$$\text{NaCl} \quad b = \frac{10 \frac{\text{g}}{\text{L}}}{58,44 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,171 \text{ M}$$

$$b \gg a$$

$$\pi = R \cdot T \cdot \frac{n(n+1)a^2 + 2ab}{na + 2b} \quad \begin{matrix} a-t \\ \text{elhanyagoljuk} \end{matrix} \rightarrow a$$

↑
ha nagyon kicsi az a, akkor elhanyagolható(amennyi már látszik, hogy $b \gg a$)

$$\pi = R \cdot T \cdot a = 0,0821 \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \cdot 298 \text{ K} \cdot 4,68 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L}} = 0,011 \text{ atm}$$

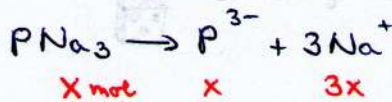
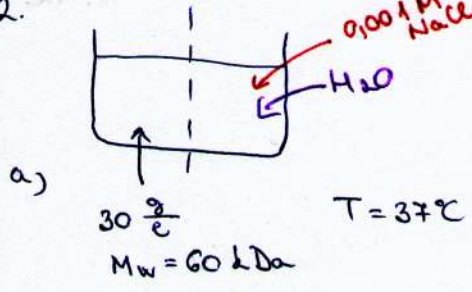
$$\Delta \phi = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{na+b}{b}$$

$$F = 9,64 \cdot 10^4 \frac{\text{C}}{\text{mol}}$$

$$R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \quad (\text{na, mint a fenti, csak más dimenzióban})$$

$$\Delta \phi = \frac{8,314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \cdot 298 \text{ K}}{1 \cdot 9,64 \cdot 10^4 \frac{\text{C}}{\text{mol}}} \cdot \ln \frac{1 \cdot 4,68 \cdot 10^{-4} + 0,171}{0,171} = 0,07 \text{ mV}$$

2.



hukkor az oldat ionerőssége?

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

↑ ↑
ion konc. ion töltése

$$I = \frac{1}{2} (x \cdot (-3)^2 + 3x \cdot (1)^2) = \frac{1}{2} \cdot (9x + 3x) = 6x$$

6x-sa lesz az eredetinek

$$C = \frac{30 \frac{g}{c}}{6 \cdot 10^4 \frac{g}{mol}} = 5 \cdot 10^{-4} M$$

$$I = 6x = 6 \cdot 5 \cdot 10^{-4} M = 3 \cdot 10^{-3} M$$

b) *oldatnak nés*
vizet öntünk a jobb o-i részre

$$\pi = R \cdot T \cdot c$$

$$\pi = R \cdot T \cdot 4 \cdot 5 \cdot 10^{-4} M = 5,09 \cdot 10^{-2} atm$$

c) jobb o-ra 0,001 M NaCl

$$\pi = R \cdot T \cdot \left(\frac{n(n+1)a^2 + 2ab}{na + 2b} \right)$$

$$\begin{aligned} n &= 3 \\ a &= 5 \cdot 10^{-4} M \\ b &= 1 \cdot 10^{-3} M \end{aligned}$$

$$\pi = 2,91 \cdot 10^{-2} atm$$

d) ismeretlen [NaCl] oldat j. o.-ra

$$\Delta \phi = 37,1 mV$$

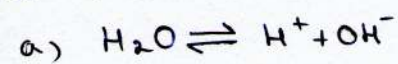
$$b = ?$$

$$\Delta \phi = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{na+b}{b}$$

↓ átrendezik

$$b = \frac{na}{e^{\frac{\Delta \phi \cdot z \cdot F}{R \cdot T}} - 1} = 5 \cdot 10^{-4} M$$

3. Reakciókinetika



$$M_w = 18 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$T = 25^\circ\text{C}$$

$$\rho = 1000 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

$$[\text{H}_2\text{O}] = \frac{1000 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}}{18 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 55,55 \text{ M}$$

$$v_d = k_d [\text{H}_2\text{O}]$$

(diszociáció)

$$v_a = k_a [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-]$$

(asszociáció)

Mi az egyensúlyi állandó?

$$K_d = \frac{1}{55,55} \cdot 10^{-14} \text{ M}$$

$$K_d = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}]} \Rightarrow \underbrace{K_d \cdot 55,55 \text{ M}}_{\text{új állandó}} = [\text{H}^+] [\text{OH}^-]$$

új állandó

$$K_w = 1 \cdot 10^{-14} \text{ M}^2 \text{ (víz ionizációja)}$$

$[\text{H}_2\text{O}]$ túl nagy szám

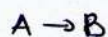
tudjuk, hogy a vízről hisz nem fog asszociálni

b) $k_d [\text{H}_2\text{O}] = k_a [\text{H}^+] [\text{OH}^-] \Rightarrow \underline{\underline{K_d = \frac{[\text{H}^+] [\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}]} = \frac{k_a}{k_d}}}$

(kérdés: a sebességi állandóktól hogy függ?)

4. Tesztkérdés

a) A dimenziója melladnadrben micsoda?



(nem függ a koncentrációtól)

$$v = k [A]^n \quad \left(\frac{\text{M}}{\text{s}} \right)$$

$$v = k [A]^0$$

$$v = k \quad \left(\frac{\text{M}}{\text{s}} \right)$$

b) — 1,5 rendű reakcióban?

$$v = k [A]^{1,5}$$

$$\frac{\text{M}}{\text{s}} = [k] \cdot \text{M}^{1,5}$$

$$\underline{\underline{[k] = \frac{1}{\text{s} \cdot \text{M}^{1/2}} = \text{M}^{-1/2} \cdot \text{s}^{-1}}}$$

5.) Arrhenius

$$E_A = 347 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$T = 20^\circ\text{C}$$

megemelen a hőmérsékletet x -szel
a sebesség 1000-szeresére nőtte

$$T_2 = 20 + x^\circ\text{C}$$

$$x = ?$$

(A hőmérséklettől függőséget ne vegyük figyelembe)

$$k = A \cdot e^{\frac{-E_A}{RT}}$$

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

$$\frac{k_x}{k_{20}} = 1000 = \frac{A \cdot e^{\frac{-E_A}{R \cdot T_x}}}{A \cdot e^{\frac{-E_A}{R \cdot T_{20}}}}$$

↓ átrendezve

$$T_x = 308 \text{ K} = 35^\circ\text{C}$$

ebben a típusban kérdezhetik:

- E_A
- x hőmérsékletemelés
- ? merésére nő a sebesség

$$x = 15^\circ\text{C}$$

$$[HO] \cdot [H] = 10^{-10} \text{ mol/l}$$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{[HO][H]}{[O_2H]} = k_1 \Rightarrow [HO][H] \cdot k_2 = [O_2H] \cdot k_1$$

(Tegyük fel, hogy a sebesség 1000-szeresére nő)

BEVEZETÉS A MOLEKULÁRIS BIOLOGIÁBA I.

09.10.

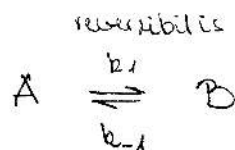
TERMODINAMIKA

előrendező $\rightarrow$ egyensúlyi rendszer
= halott

kinetika $\rightarrow$ folyamatok

ÉLET $\rightarrow$ folyamatok összessége

Reakció kinematika



$[B]_{eq}$ termék
[] koncentráció
g / l

$\frac{[B]_{eq}}{[A]_{eq}} = K_{eq}$ egyensúlyi, állandó
termék
kezdő koncentrációja

$$K_{eq} = \frac{[B]_{eq}}{[A]_{eq}} = \frac{k_1}{k_{-1}} \quad \text{egyensúly}$$

ΔG° Δ különbség kezdeti áll $\rightarrow$ jelen között

Gibbs féle sztenderd

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_{eq} = -RT \ln \frac{[B]_{eq}}{[A]_{eq}}$$

egyetemes
gázállandó

1 mol

abszolút
hőmérséklet

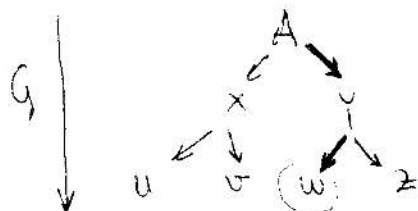
K

Gibbs féle sztenderd szabad energia

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

hol mindig
 ΔG° -hoz
képest

hol az
egyensúly



szabadenergia

Def. Reakció sebesség

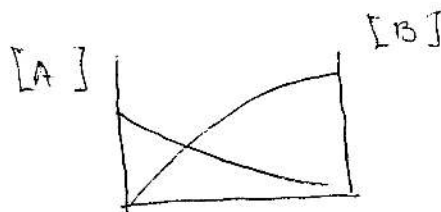
v



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

$$v_2 = + \frac{d[B]}{dt}$$

konzentráció megváltozása
idő



$$v = - \frac{d[A]}{3dt}$$

STÖCHIOMETRIAI állandó

1 bizonyos reakcióban,
1 fajta anyagból hány db van

$$v = - \frac{d[A]}{3dt} = - \frac{d[B]}{4dt}$$

$$= + \frac{d[C]}{5dt}$$

idő

Sebességi egyenlet

seb. hogy függ a koncentrációtól

$$v = f(c_1, c_2, \dots, c_n)$$

sebességi állandó:



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

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

↑
sebességi
állandó

↑
reakció rendje

2. rendű reakció : 2 részecske összehatás

3. rendű : 1 picosec. nagyon ritka

Lej. Reakció mechanizmus

amit gondolunk, h történik a részecskék
szintjén

Pl. 2 részecske összehatás

Elemi reakció

részecskéik ütközése



jodid-ion

Teljes reakció

$$v_T = - \frac{1}{2} \frac{d[H_2O_2]}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d[H_2O]}{dt} = \frac{d[O_2]}{dt}$$

$$v_T = k [H_2O_2] [I^-]$$

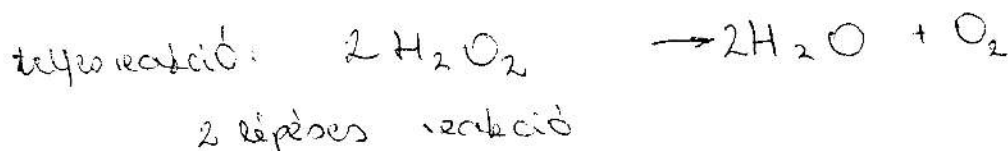
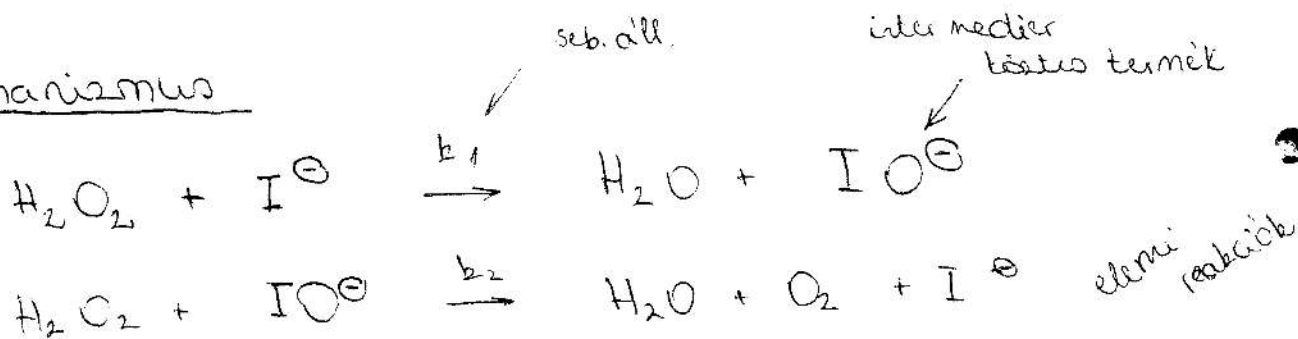
kell katalizátor?!

1. rendű H_2O_2
1. rendű I^-

} $\Rightarrow$

2. rendű az egészben

Mechanizmus



KOMPLEX REAKCIÓ

- hogy függ a sebessége a koncentrációtól?

I. Seb. meghatározó lépés $k_1 \ll k_2$

- 2. reakció: első végtermékeiből

2 lépés sebessége nem lehet több mint az 1.

pl. vaslevegőben } mennyi víz?
vékony } amennyi vékonyban

Reakcióhoz

1. 2 részecske ütközik

2. jól kell illeszkedni (mint enzim...)

valószínűségi faktor

p. 0,1 - 1 között

3. energia kell (átmeneti)

maximális kitérő

AKTIVÁLÁSI energia

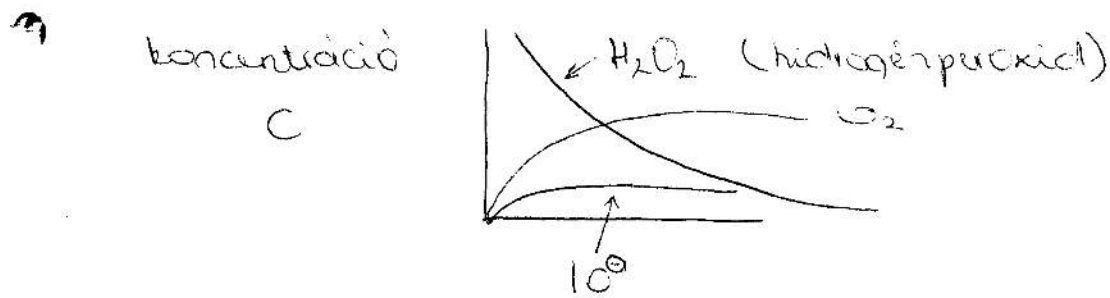
↑ részecske seb. - től függ

↑ hőmérséklettől

$$V_T - V_1 = k_1 [\text{H}_2\text{O}_2] [\text{I}^\ominus]$$

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

II. Steady state



steady state - ugyanannyi termelődik,

mint amennyi fogy

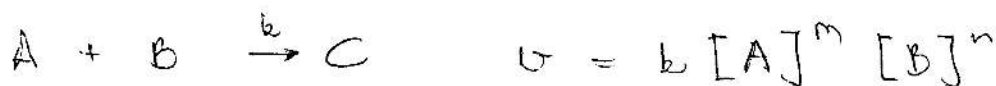
$$\frac{d[\text{IO}^\bullet]}{dt} \cong 0 = \underbrace{k_1 [\text{H}_2\text{O}_2] [\text{IO}^\bullet]}_{\text{termelés}} - \underbrace{k_2 [\text{H}_2\text{O}_2] [\text{IO}^\bullet]}_{\text{fogyás}}$$

k_1 seb. állandó $\times C =$ időegység alatt mennyi termelődik

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

$$\begin{aligned} v_2 &= \frac{d[\text{O}_2]}{dt} = k_1 [\text{I}^\bullet] [\text{H}_2\text{O}_2] - k_2 [\text{IO}^\bullet] [\text{H}_2\text{O}_2] = \\ &\Rightarrow k_2 \left(\frac{k_1}{k_2} \right) [\text{I}^\bullet] [\text{H}_2\text{O}_2] \end{aligned}$$

reakció rendszere $\rightarrow$ kísérlettel !!!



kísérlet

		$[\text{A}]_0$ / mM (kezd.)	$[\text{B}]_0$ / mM	v (seb.)
kísérlet	1.	1	5	0,001
	2.	5	5	0,025
	3.	10	5	0,100

$[\text{A}]_0$ / mM

koncentráció (millimól) kezdeti

v_0 - kezdeti sebesség mM / min⁻¹

millimól / perc

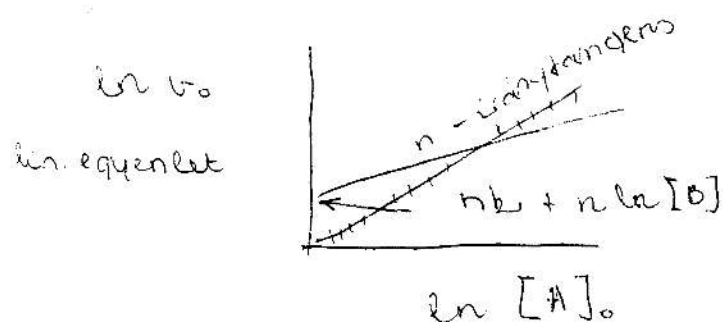
mivel $v_0 \propto [A]^m$

A-ban 2. rendű

$$v = k [A]^m [B]^n \Rightarrow \ln v_0 = \ln k [A]^m [B]^n =$$

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

← konstans



2 kísérleti adataiból
meghatározható

- k
- n
- m

iránytangensek n, m

tengelymetszet k

gyakorlat 1.

gyyimesi @ enzim.hu

<http://digitus-ittk-ppke.hu/~gyyimesi>

Termodinamikai állapot függvények TD

U (belső) energia

S entropia

H entalpia

F (Helmholtz -féle) szabadenergia

G (Gibbs -féle) szabadentalpia

$$U(T, p, V, n)$$

intenzív extenzív

4. kiszámítható
másik 3-ból

ha a rendszer
egyensúlyban van

$$pV = nRT$$

$$U \rightarrow (T, D, I.) \quad \Delta U = dq + dw$$

energiaátadás

$$V = \text{const} \Rightarrow \Delta U = dq - p_{\text{ex}} dv$$

rendszere
jelenlegi állapot változás

Entalpia H

def: $H = U + pV$

$$dH = dU + d(pV) = \dots = dq$$

$p = \text{const}$
↓

$$= dq - p_{\text{ex}} dv + p dv + V dp =$$

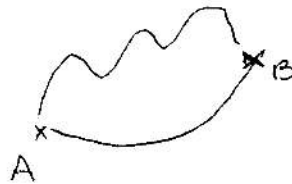
Entropia S

$$S(T, p, V, n)$$



pl.

nyomó
atomok sebessége



$$S = k_B$$

↑
Boltzmann
állandó

$$S(T, p, \dots)$$

$$\ln W$$

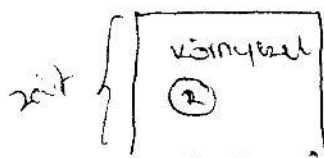
↑
termodinamikai
valószínűség

$$W(T, p, \dots)$$

Termodin. II.

Spontán

zárta rendszer



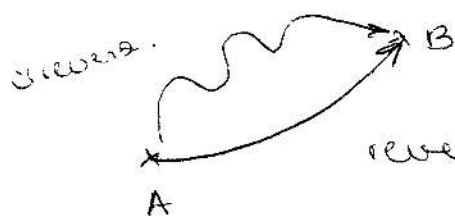
$$\Delta S \geq 0$$

total

a teljes entropia változása

entropia

~ additív mennyiség : $S_{sz} + S_k$



$$dS_{rev} = \frac{dq_{rev}}{T}$$

($T = \text{const}$)

$$dS_{irr} = dS_{rev} \Rightarrow \left(dS_{irr} \geq \frac{dq_{irr}}{T} \right)$$

Rev. egyensúlyi állapotok közötti A → B le



állapot függvény

$$\text{irreverzibilis} \quad ds \geq \frac{dq}{T}$$

$$F = U - TS$$

$$\begin{aligned} V &= \text{const} \\ T &= \text{const} \end{aligned}$$

↓

$$dF = dU - \cancel{SdT} - Tds = dq - Tds \leq 0$$

$$\left(ds \geq \frac{dq}{T} \quad \text{Clausius -féle egyenlőtlenség} \right)$$

szab. nyom. folyamat dF (szab. energia) : $\neq$ névkedhet
 hőmérés. térfogat } állandó

$$G = H - TS$$

$$dG = dq - T_g S \leq 0$$

$$\begin{aligned} \uparrow \\ p &= \text{const} \\ T &= \text{const} \end{aligned}$$

$$dG = dH - T dS$$

csökkenli az entropiát
V növeli az entalpiát



$$dS < 0$$

$$dH < 0$$

csök. entalpia

↓
rendszertelebb

(S) Entropia: Egy reverzibilis rendszer folyamat közben
hőmennyiséget vesz fel (v. ad le)

(H) Entalpia: zárt rendszer Δ energiatartalma

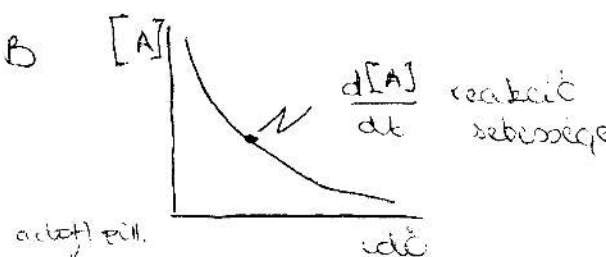
Reakciók fajtái.

1. rendű reakció



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

a koncentráció
(-) fogy



Integrálás

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = -k \int_0^t dt$$

sebes. állandó

idő pill. $[A]$

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = -k \int_0^t dt$$

kezdeti konc.

$$\ln[A] \Big|_{[A]_0}^{[A]} = -k t \Big|_0^t$$

$$\ln[A] - \ln[A]_0 = -kt$$

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

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

- bármilyen időpill. kiszámítható a koncentráció

1. rendű folyamat

$\Rightarrow$ Exponenciális egyenlet

$$\boxed{[A] = [A]_0 e^{-kt}} \quad = [A]_0 e^{-t/\tau}$$

$$\tau = \text{RELAXÁCIÓS IDŐ} = 1/k$$

Radioaktív bomlás

$$\lambda = \text{BOMLÁSI ÁLLANDÓ}$$

$$= k \quad (\text{seb. állandó})$$

$$\tau = \text{ÉLETIDŐ}$$

$$= 1/k \quad (\text{relax. idő})$$

Félezési idő

$$T_{1/2}$$

$$n = \frac{m_0}{2} = m_0 e^{-T_{1/2}/\tau}$$

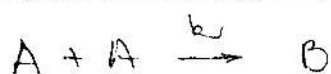
Felelés idő $\tau_{1/2}$

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

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

- sebességi állandó
 - életidő
 - feleletidő
- } egymásból kiszámítható

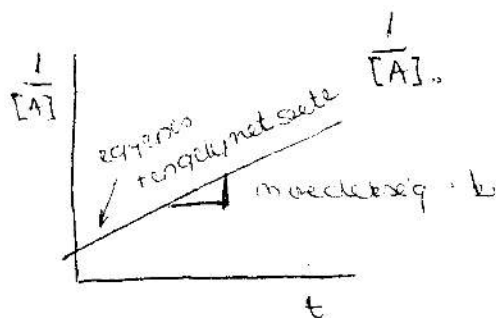
2. RENDŰ reakciók



$$\frac{-d[A]}{dt} = k[A]^2 \rightarrow - \int_{[A]}^{[A]_0} \frac{d[A]}{[A]^2} = \int_0^t k dt$$

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

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



$$y = mx + b$$

márcsak b $\swarrow$ $\nwarrow$ tengelymetszet $\frac{1}{[A]_0}$

Arrhenius elmélet

- 1889 kísérlet
- reakciósebesség elmélet
 - ↳ hogy függ hőmérséklettől



üzsödni időegység alatt A részecske hány B részecskét üt meg?



A mozog
B áll

$$V_{\text{henger}} = \pi (r_A + r_B)^2 v_A$$

Hány B-vel találkozik?
 $\times [B]$

$$Z = \text{ütközések száma} = \underbrace{\pi (r_A + r_B)^2}_{\text{terfogl.}} \underbrace{[A][B]}_{\text{koncentráció}} v_{\text{rel}}$$

ütközések
sebessége
 v_{rel}

részecskék RELATÍV SEBESSÉGE

$$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} k_B T \quad \leftarrow \text{hőmérséklet}$$

Boltzman áll.
/ átlagos mozgási energiá /

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

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

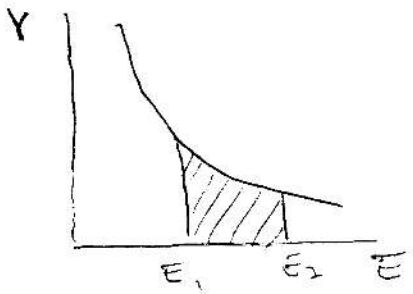
$$(P \cdot Z) = \pi (r_A + r_B)^2 \left[\frac{8 k_B T}{\pi \mu} \right]^{1/2} [A][B] P$$

↑
valósz. faktor

P = VALÓSZÍNŰSÉGI FAKTOR

$\approx 0,1 - 1,0$ között

Maxwell clauds



analiza: $\sum$ 10.520562221

11/ addit E-jü n'se'ce'ek m'om

reakció oxidációs

2 részre bontva egyenletjele (össze fogynak utközzük)

→ 2 köztölti egyenes

$$T_{\text{enilut}} = \int_{E_1}^{E_2} Y dE = \frac{m(E_2) - m(E_1)}{N}$$

teljus tészerbe zai n

$$Y = \frac{1}{2T} e^{-E/2T}$$

reakcióseb. áll. $\leq$ $\begin{matrix} \text{alk. máma} \\ \text{lésszék} \\ \text{legendó E} \end{matrix}$ orientációja

2 x 999 hòm-tôi

$$G = \frac{\pi (r_A + r_B)^2 \left[\frac{8k_B T}{\pi \mu} \right]^{1/2} [A][B] P e^{-E^*/R T}}{Z}$$

$$b = \pi (r_A + r_B)^2 \left[\frac{8k_B T}{\pi \mu} \right]^{1/2} P e^{-E^*/RT}$$

Arrhenius bondans

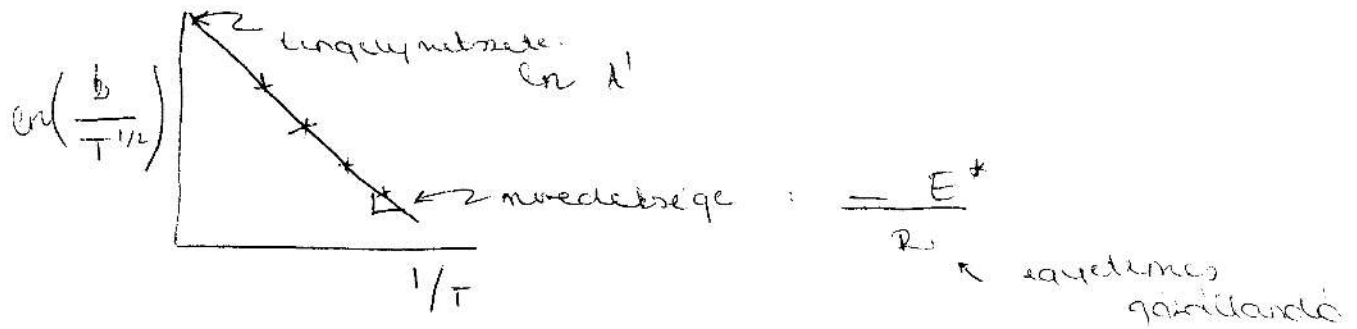
$$k = A e^{-E^{\ddagger}/RT}$$

$$A = A' T^{1/2}$$

$$A' = \pi(r_A + r_B)^2 \left[\frac{8k_B}{\pi \mu} \right]^{1/2} \Phi$$

$$\frac{k_1}{T^{1/2}} = A' e^{-E^*/RT} \rightarrow \ln\left(\frac{k_1}{T^{1/2}}\right) = \ln A' - \frac{E^*}{RT}$$

ábrázoljuk: $\ln\left(\frac{k_1}{T^{1/2}}\right)$ vs $\frac{1}{T} \rightarrow E^*$ aktiválás E

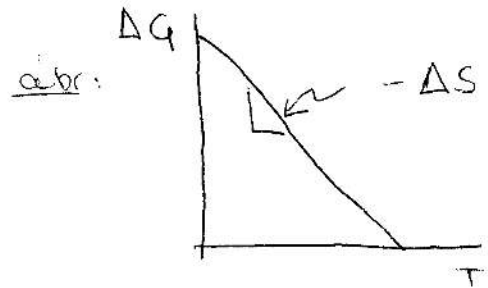


(Gázfázisú reakció)

$$1. \Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

potenciális $\rightarrow \frac{\partial(\Delta G)}{\partial T} = 0 - \Delta S$

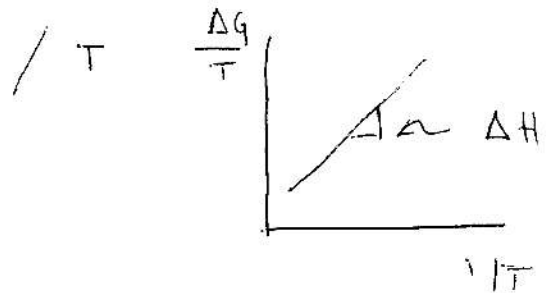
Törvényszerű



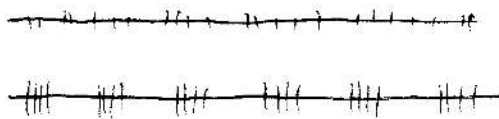
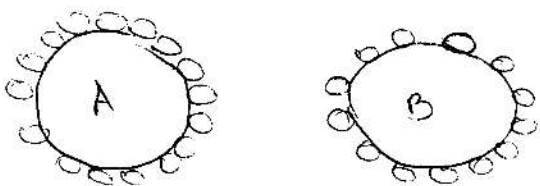
2. Hammett-Holt egyenlet

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

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



Reakció oldatokban



hasznotkötés a katalízis során

gáz

oldat

(oldószer) / oldószer

- oldószerrel szembe nem áll
- oldószerrel szembe nem áll

E* nagy

nincs külső befolyás

E* kicsi

DIFFUZIÓ KONTROLLÁLT REAKCIÓ

Gibbs -féle szabadenergiája

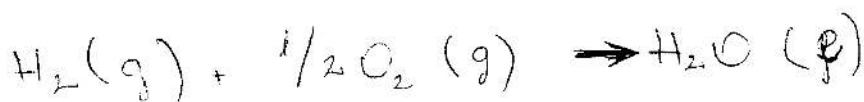
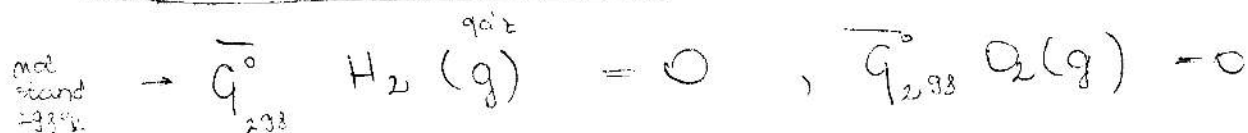


$$\Delta G = G_{\text{vég}} - G_{\text{kezdeti}}$$

$G = 0$ elem, standard állapotban (tiszta, koncentráció 1)
1 atom nyomás, 298°K

(1 term. $\log = 0$) $\ln 1 = 0$

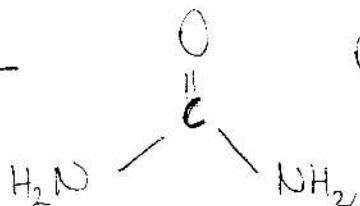
vegyület szabadenergiája



$$\Delta G_{\text{képződés}} = \bar{G}_{298}^{\circ} \text{H}_2\text{O}(\text{l}) - \bar{G}_{298}^{\circ} \text{H}_2(\text{g}) - \frac{1}{2} \bar{G}_{298}^{\circ} \text{O}_2(\text{g})$$

$$\bar{G}_{298}^{\circ} \text{H}_2\text{O}(\text{l}) = -56.69 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$$

Urea



$$\text{O} + \text{N} + \text{H} + \text{C} \rightarrow \bar{G}_{298}^{\circ} \text{urea}(\text{sz}) = -47.12 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$$

Urea urea oldat

1. víz
2. urea

(oldószer)
(oldott anyag)

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

szab. en.
megváltozása

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

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

μ_1, μ_2 = KÉMIAI POTENCIÁL

- nem függ anyag mennyiségétől
- csak összetételről
- hőm (T), nyomás (P) állandó

- FÁZLAGOS MENNYISÉG

INTENZÍV

- hőmérséklet
- kémiai Potenciál
- nyomás

EXTENZÍV

- tömeg
 - térfogat
 - szabad E
- } anyagmennyiség-től függ

Egyidejűleg - te vonatkozó

: FÁZLAGOS

Szabadenergia:

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

Kémiai potenciál

- hajtja a rendszert
- ha rendszert magára hagyjuk $\rightarrow$ pot. kiegyenlítődik ($\sim$ Ozmózis)
- hig oldatokban $\rightarrow$ oldószertől ad képet

$$dG = \mu_1 \underset{\substack{\uparrow \\ \text{kim. pot}}}{dn_1} + \mu_2 \underset{\substack{\uparrow \\ \text{oldatanyag}}}{dn_2}$$

G Gibbs - je szabadenergia · szabadentalpia

ΔG változás

$\Delta G = 0$ egyensúly

$T = \text{all.}$ (37°C · ember)

$P = \text{all.}$

} mennyi hőmérséklet munkát végezhető?

$$A \rightarrow B \quad \Delta G = \Delta G^\circ + R \cdot T \cdot \ln Q \quad Q = \frac{[B]}{[A]}$$

$$\text{egyensúly} \quad 0 = \Delta G^\circ + R \cdot T \cdot \ln K \quad K = \frac{[B]_{\text{eqy}}}{[A]_{\text{eqy}}}$$

$$\Delta G < 0$$

egyensúly, állandó

- munkát végez

- rendszer ad ki E-t



$$\Delta G > 0$$

- $B \leftarrow C$

$$\Delta G = 0$$

- egyensúly



- élő rendszerrel

: haldal

Reakciókinematika



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

rendűsége

aktiválási E

reakció seb. állandó

$k(t)$

enne

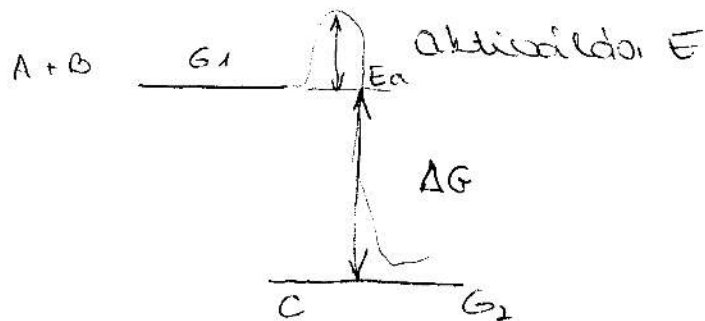
k reakc. seb. együttható

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_A}{R \cdot T}}$$

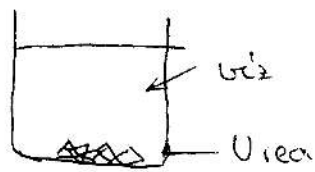
$$A \cdot T^{1/2}$$

elhangyagolható

- his képest



G Gibbs-féle szabadenergia, szabadentalpia.

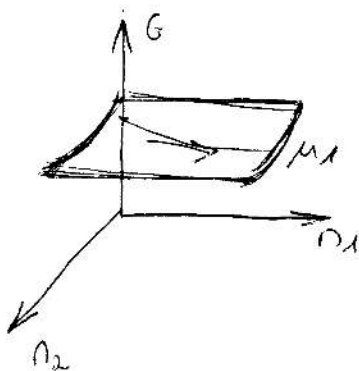


ΔG

$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial n_1} \right)_{\substack{n_2, T, P \\ \text{áll}}} dn_1 + \left(\frac{\partial G}{\partial n_2} \right)_{\substack{n_1, T, P \\ \text{áll}}} dn_2 + \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{n_1, n_2, P}^{\text{áll}} dT + \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_{n_1, n_2, T}^{\text{áll}} dP =$$

$$dG = \underbrace{\mu_1}_{\text{mű}} \cdot dn_1 + \mu_2 dn_2$$

többit állandónak tekintjük



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

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

additívitás szabály

teljes differenciál:

$$dG = \mu_1 dn_1 + \mu_2 dn_2 + n_1 d\mu_1 + n_2 d\mu_2$$

$$0 = n_1 d\mu_1 + n_2 d\mu_2$$

Gibbs-Duhem
egyenlet

→ ha ismerjük μ_1 -et → ki lehet számítani μ_2 -t.
 $\mu(T, P, n_1/n_2)$ függvénye

$$d\mu_2 = -\left(\frac{n_1}{n_2}\right) d\mu_1$$

$$\int_{\mu_2^0}^{\mu_2} d\mu_2 = -\int \frac{n_1}{n_2} \cdot d\mu_1$$

$$\mu_2 - \mu_2^0 = -\int \frac{n_1}{n_2} \cdot d\mu_1$$

Raoult törvény: kémiai potenciál ideális oldatra

$$\mu_1 = \mu_1^0 + R \cdot T \cdot \ln \chi_1$$

$$\chi_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \quad \text{móltört} \quad \left(\frac{\text{adott mol}}{\Sigma \text{ mol}} \right)$$

μ_1^0 : standard kémiai potenciál

μ_1 : adott kém. pot.

Ideális oldat = 'Híg oldat' $\chi_1 \approx 1$ $\chi \leq 1$

Reális oldat = Törvény

$$\chi_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2} = \frac{P_1}{P_1^0} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{gőznyomások} \\ \text{hányadosa} \end{array} \right. \quad \text{tiszta víz oldat}$$

$$\chi_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} \quad \frac{\chi_1}{\chi_2} = \frac{n_1}{n_2}$$

$$\chi_1 + \chi_2 = 1 \Rightarrow d\chi_1 + d\chi_2 = 0 \Rightarrow d\chi_2 = -d\chi_1$$

$$d\mu_1 = \cancel{d\mu_1^0} + R \cdot T \cdot d(\ln \chi_1) \rightarrow \frac{d\chi_1}{\chi_1}$$

$$\mu_1 = \mu_1^0 + R \cdot T \ln \frac{P_1}{P_1^0}$$

$$\boxed{\mu_1 = \mu_1^0 + R \cdot T \cdot \ln \chi_1}$$

$$d\mu_1 = R \cdot T \frac{dx_1}{x_1}$$

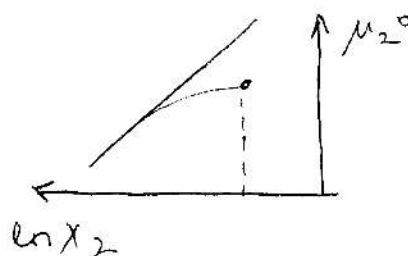
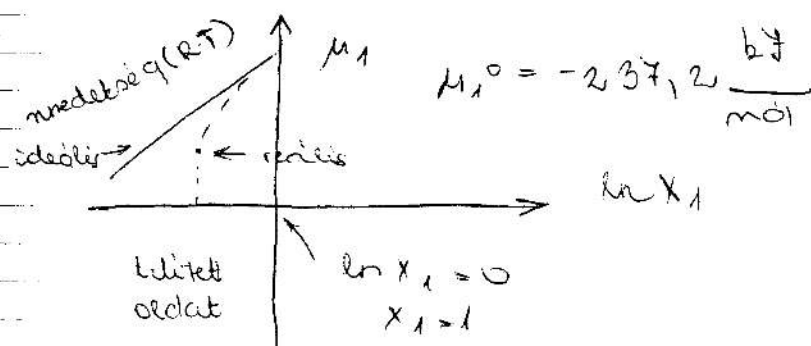
$$\mu_2 - \mu_2^0 = - \int \frac{n_1}{n_2} R \cdot T \frac{dx_1}{x_1}$$

$$\mu_2 - \mu_2^0 = -R \cdot T \int \frac{x_1}{x_2} = R \cdot T \cdot \frac{dx_2}{x_2}$$

$$\boxed{\mu_2 = \mu_2^0 + R \cdot T \cdot \ln x_2}$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{híg oldat} \\ x_1 \approx 1 \\ x_2 \approx 0 \end{array} \right)$$

$$x_1 + x_2 = 1 \Rightarrow dx_1 + dx_2 = 0 \Rightarrow dx_2 = -dx_1$$



$$\mu_1 = \mu_1^0 + R \cdot T \cdot \ln \left(\frac{p_1}{p_0} \right) \text{ valóság oldat}$$

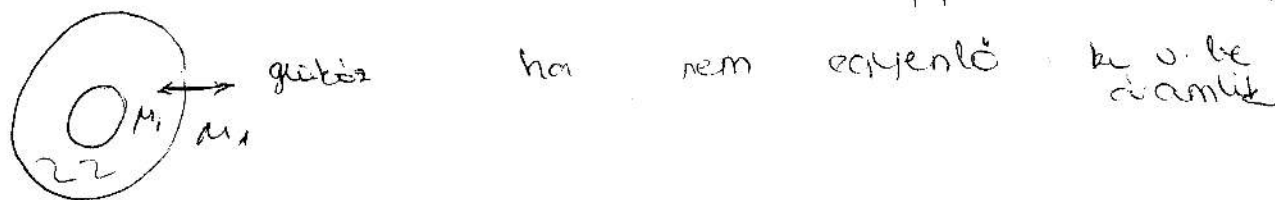
$$X \text{ molfrákció} \quad \lambda = \frac{n_1}{\sum n_i}$$

$$\text{molaritás} \quad \frac{n_1}{V} \left(\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \right) \text{ M } (25^\circ\text{C})$$

$$\left(\begin{array}{lll} \text{molaritás} & \frac{n_1}{\text{oldószer tömege}} & \frac{\text{mol}}{\text{kg}} \end{array} \right) \begin{array}{l} \swarrow \text{oldott anyag} \\ \nwarrow \text{oldószer} \end{array}$$

glükóz	0,01 - 0,1 M
NaCl	≈ 0,001 M
zárójel	10 ⁻⁶ - 10 ⁻⁵ M

Sept. az az anyag, ami szabadon át tud járni a fázisok között $\rightarrow$ kém. potenciálja egyenlő



(, Egyensúly esetén a KÉMIAI POTENCIÁL megegyezik azon fázisok között, ahol átjárható)

X mólfrakció $X = \frac{n_1}{\sum n_i}$

molaritás $\frac{n_1}{V} \left(\frac{\text{mól}}{\text{dm}^3} \right) M (25^\circ\text{C}) = c$

(molaritás $\frac{n_1}{\text{oldószertömeg}} \frac{\text{mól}}{\text{kg}} \leftarrow \begin{matrix} \text{oldott anyag} \\ \text{oldószer} \end{matrix} \right)$

$$X_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} = \frac{n_2 / 18}{n_1 / 18 + n_2 / 18} = \frac{C_2}{C_1 + C_2}$$

z.h. $C_{\text{viz}} = \frac{1000 \text{ g}}{18 \text{ g/mól}} = 55,55 \text{ M} \quad / \text{víz oldat}$

víz móláris koncentrációja: $M_{w_{\text{viz}}} = 18 \frac{\text{g}}{\text{mól}}$

$X = \frac{C_2}{C_1 + C_2} \leftarrow 0,01 \text{ (oldott anyag)} \approx \frac{C_2}{55,55}$

$\begin{matrix} 55,55 \\ \uparrow \\ \text{1} \\ \text{0,01} \end{matrix}$ elhanyagolható

$$\mu_2 = \mu_2^\circ + R \cdot T \cdot \ln \frac{C_2}{55,55}$$

$$\mu_2 = \underbrace{\mu_2^\circ - R \cdot T \cdot \ln 55,55}_{\mu_2^\square} + R \cdot T \cdot \ln C_2$$

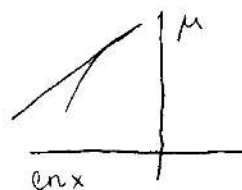
$$\mu_2 = \mu_2^\circ + R \cdot T \cdot \ln C_2 \quad \leftarrow \frac{\text{mól}}{e}$$

$\uparrow$
 $\frac{C_2}{1M}$

n már kiszámítható
/Rendelt - törv.
Φ mértékegység/

Ideális eset:

$$\mu_{id} = \mu_{id}^\circ + R \cdot T \cdot \ln C_2$$



aktivitás

- jele: a
- mértékegység (M)

$$a_2 = \gamma_2 \cdot C_2 \quad \leftarrow (M)$$

AKTIVITÁSI KOEFFICIENS

$$\mu_{id} = \mu_{id}^\circ + R \cdot T \cdot \ln C_2$$

$$\mu_{real} = \mu_{id}^\circ + R \cdot T \cdot \ln a_2$$

AKTIVITÁS

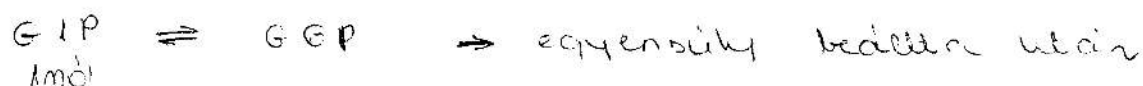
- koncentrációs oldatokban
- akt. coeff. : 2 mennyiség között + terendi a kapcsolatot

$$\mu_{id} = \mu_{id}^\circ + R \cdot T \cdot \ln \frac{a_2}{C_2}$$

$$\mu_{real} - \mu_{ideal} = R \cdot T \cdot \ln \gamma_2$$

Gyakorlat 2.

/zn-hoz hasonló/



? móli G1P
? móli GGP

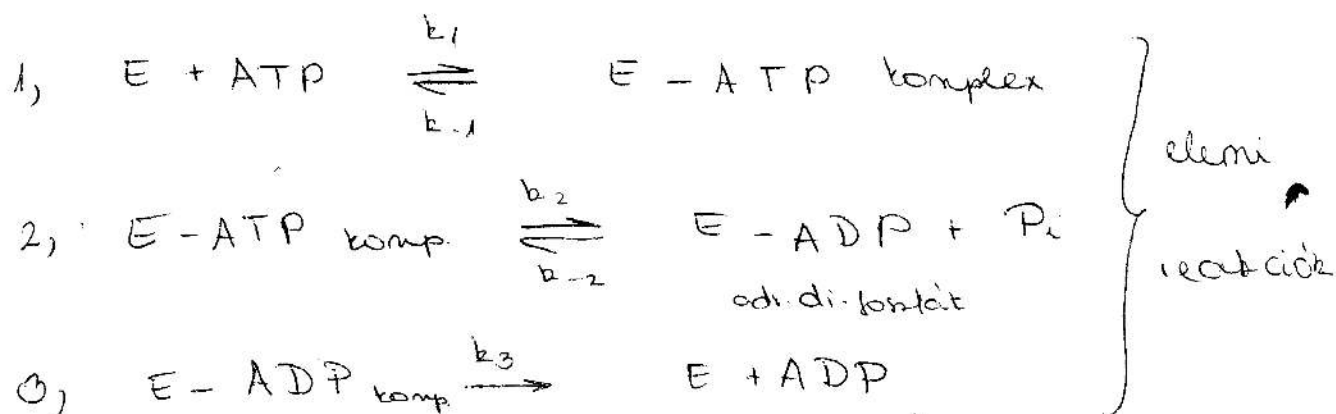
alatt $\left\{ \begin{array}{l} \Delta G^\circ = -7,1 \frac{\text{kJ}}{\text{mól}} \quad (25^\circ\text{C}) \\ R = 8,3145 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mól}} \end{array} \right.$

$$\underline{U_0} \quad \Delta G^\circ = -RT \ln K$$

$$K = \frac{\Delta G^\circ}{\ln(-RT)} = 14,55$$

② ATP E (enzim)

adenalin-tri-foszfát



sebességi meghatározás lépés

• Mi a bruttó reakció egyenlet?



többi ki van

• reaktáns : ATP

• katalizátor : E / része vesz, de végtermékben nem jelenik meg /

• átmeneti termék : E-ATP, E-ADP

• végtermék : ADP, P_i

$$\frac{-d[ATP]}{dt} = ? \quad v_3 = k_3 \cdot [E-ADP] = -\frac{d[ATP]}{dt}$$

Elemi reakció : rendszerre = hány molekula alatul át



~~$k_3 \neq 0$~~

$$k_2 = \frac{[E-ADP][P_i]}{[E-ATP]} = \frac{k_{-2}}{k_{-1}} \Rightarrow [ADP] = \frac{k_2[E-ATP]}{[P_i]}$$

$$K_1 = \frac{[E-ATP]}{[E] \cdot [ATP]} = \frac{k_{-1}}{k_{-2}} \Rightarrow [E-ATP] = K_1[E][ATP]$$

$$[E-ADP] = \frac{K_1 K_2 [E][ATP]}{[P_i]}$$

$$k_3 = v_{\text{net}} = k_3 \frac{K_1 K_2 [E][ATP]}{[P_i]} = \frac{k_3 k_2 k_1 [E][ATP]}{k_{-1} \cdot k_{-2} [P_i]}$$

3. $E_A = 310 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$

$t_1 = 20^\circ\text{C}$
 $t_2 = 25^\circ\text{C}$ } Hogyan változik a reakció sebessége?

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_A}{RT}}$$

$$V_1 = k_1 [A][B] \quad \frac{V_1}{V_2} = \frac{k_1}{k_2}$$

$$V_2 = k_2 [A][B]$$

$$k_1 = A e^{-\frac{E_A}{RT_1}} \quad \Rightarrow \quad \frac{k_2}{k_1} = \frac{A e^{-\frac{E_A}{RT_2}}}{A e^{-\frac{E_A}{RT_1}}}$$

$$k_2 = A e^{-\frac{E_A}{RT_2}}$$

$$\frac{k_2}{k_1} = e^{\frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)} \quad R = 8,3144 \frac{\text{J}}{\text{K mol}}$$

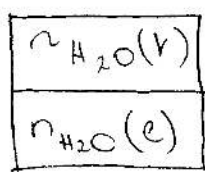
$$T = t + 273$$

$$T_1 = 293 \text{ K}$$

$$T_2 = 298 \text{ K}$$

$$\frac{k_2}{k_1} = e^{\frac{31 \cdot 10^5 \text{ J/mol}}{8,3144 \text{ J/mol}} \left(\frac{1}{293 \text{ K}} - \frac{1}{298 \text{ K}} \right)} e^{2,135} = \underline{\underline{8,45}}$$

heterogén zrt rendszer : OZMÓZIS



$$dG_{\text{rendszer}} = \left(\frac{\partial G}{\partial n_2} \right) dn_2 + \left(\frac{\partial G}{\partial n_1} \right) dn_1$$

v : víz
 l : "vízgőz"

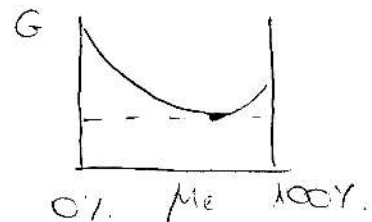
$$dG = \mu_l dn_l + \mu_v dn_v$$

$$n_l + n_v = \text{konstans} \quad dn_l + dn_v = 0 \Rightarrow dn_l = -dn_v$$

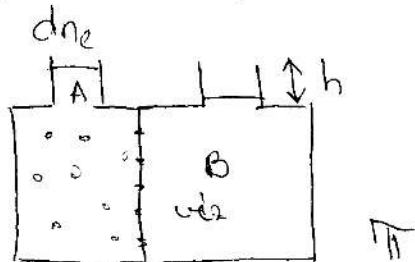
$$dG = \mu_l dn_l - \mu_v dn_l = (\mu_l - \mu_v) dn_l$$

$$\frac{dG}{dn_l} = \mu_l - \mu_v$$

$$\frac{\partial G}{\partial n_l}$$



permeabilis membrán



$$\mu_l - \mu_v = 0 \quad \mu_l \neq \mu_v$$

$$H = 25.000$$

$$10 \text{ g/l} \quad h = 10 \text{ cm} \quad g = 980 \text{ cm/s}^2$$

π

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

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

$$\mu(T, p, x)$$

$$\mu_{1,A}(T, p + \pi, x_{1,A}) = \mu_{1,B}(T, p, x_{1,B})$$

$$\mu = f(p, x)$$

$$\mu_{1,A}(p + \pi, x_{1,A}) = \mu_{1,A}^\circ(\pi + p) + RT \ln \gamma_{1,A} x_{1,A}$$

$$\mu_{1,B}(p, x_{1,B}) = \mu_{1,B}^\circ(p) + RT \ln \gamma_{1,B} x_{1,B} = \mu_{1,B}^\circ(p) \quad \text{if } x_{1,B} = 1, \gamma_{1,B} = 1$$

mivel tisztán víz

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

$$\mu_{1,A}^{\circ} (\pi + p) - \mu_{1,B}^{\circ} (p) = -RT \ln x_{1,A} - RT \ln \gamma_{1,A}$$

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

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

$$\left(\frac{\partial V}{\partial n} \right)_{T,p} = \bar{V} \quad \text{moules molaire temporelle}$$

$$\partial \mu_1^{\circ} \quad p \rightarrow p + \pi$$

$$\mu_1^{\circ}(p + \pi) - \mu_1^{\circ}(p) = (\bar{V}_1^{\circ}) (\pi)$$

$$\int_p^{p+\pi} \partial \mu_1^{\circ} = \int_p^{p+\pi} \bar{V}_1^{\circ} \partial p$$

$$\mu_1^{\circ}(p + \pi) - \mu_1^{\circ}(p) = \bar{V}_1^{\circ} \pi$$

$$\bar{V}_1^{\circ} \pi = -RT \ln x_{1,A} - RT \ln \gamma_{1,A}$$

$$x_2 = 10^{-5}$$

$$x_1 + x_2 = 1 \quad x_1 = 1 - x_2$$

$$\begin{aligned} \bar{V}_1^{\circ} \pi &= -RT \ln (1 - x_2) - RT \ln \gamma_1 \rightarrow \bar{V}_1^{\circ} \pi = +RT x_2 - RT \ln \gamma_1 \\ &= RT \frac{n_2}{n_1} - RT \ln \gamma_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \ln(1-d) &= -d \\ \ln(1+d) &= d \end{aligned} \quad d \ll 1$$

$$x_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2}$$

$$x_2 \approx \frac{n_2}{n_1} \quad n_1 \gg n_2$$

$$\pi = \frac{RT n_2}{n_1 \bar{V}_1^{\circ}} - \frac{RT \ln \gamma_1}{\bar{V}_1^{\circ}}$$

$$\pi = \frac{RT n_2}{V} - \frac{RT \ln \gamma_1}{\bar{V}_1^{\circ}}$$

$$\pi = \frac{RT n_2}{M_2} - \frac{RT \ln \gamma_1}{\bar{V}_1^{\circ}}$$

$$n_1 \bar{V}_1^{\circ} = V_1$$

$$\gamma_1 \approx 1 \rightarrow \ln \gamma_1 = 0$$

$$\pi = \frac{RT n_2}{M_2} = C_2 RT$$

$$\pi \cdot V_{\text{total}} = n_2 RT$$

$$C_2 = \frac{n_2}{V_{\text{total}}}$$

$$\pi = 0,01 \text{ atm}$$

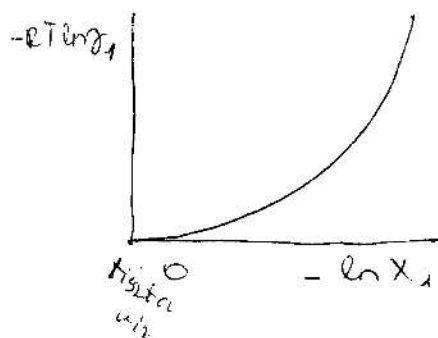
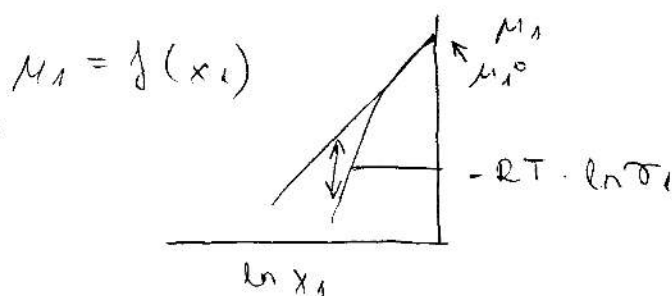
$$M_2 = \frac{RTW_2}{\pi}$$

$$C_2 = \frac{n_2}{V_{\text{total}}}$$

$$C_2 = \frac{W_2}{M_2}$$

$$C: \text{mol/l} \quad \text{mol/dm}^3 \quad W: \text{g/l} \quad M: \text{g/mol}$$

$$\pi = \frac{RTW_2}{M_2} - \frac{RT}{V_1^0} \ln \gamma_1$$



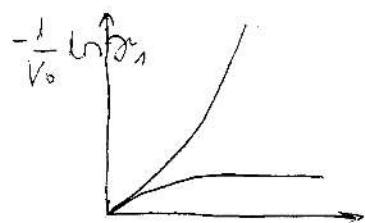
$$\ln x_1 = 0 \quad \ln \gamma_1 = 0$$

$$x_1 = 1 \quad x = 1$$

$$-\ln x_1 = -\ln(1 - x_2) \approx x_2$$

$$\frac{1}{RT} \frac{RT}{V_1^0} \quad 55,55 M_2$$

$$X_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} \approx \frac{n_2}{n_1} = \frac{C_2}{C_1} = \frac{C_2}{55,55} = \frac{W_2}{55,55}$$



$$-\frac{1}{V_1^0} \ln \gamma_1 = B_0 + B_1 W_2 + B_2 W_2^2 + \dots$$

$$W_2 = 0 \quad -\frac{1}{V_1^0} \ln \gamma_1$$

$$B_1 = ?$$

$$\frac{\partial \left(-\frac{1}{V_1^0} \ln \gamma_1 \right)}{\partial W_2} = B_1 + 2B_2 W_2$$

$$W_2 = 0$$

$$B_1 = 0$$

$$-\frac{1}{V_1^0} \ln \gamma_1 = B_2 W_2^2 + B_3 W_2^3 + \dots$$

$$\pi = RT \frac{W_2}{M_2} + RT (B_2 W_2^2 + B_3 W_2^3 + \dots)$$

$$\frac{\pi}{w_2} = RT \left(\frac{1}{M_2} + B_2 w_2 + \underbrace{\text{magyarabb rendű tagok}}_{\text{elhanyagolhat}}$$

$$\frac{\pi}{w_2} = RT \left(\frac{1}{M_2} + B_2 w_2 \right) \quad \text{virális expanszió}$$

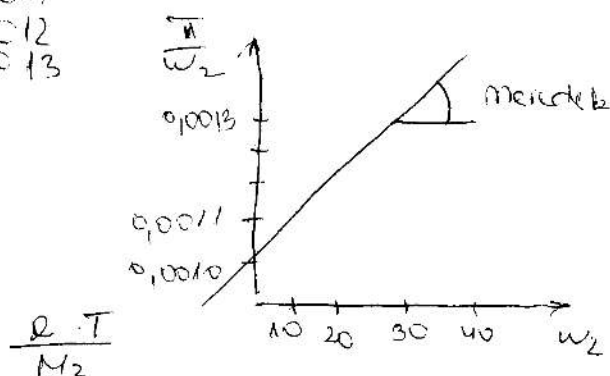
$\swarrow$ 1. vir. koef. $\searrow$ 2. v. k.

$$\frac{1}{\bar{V}_1^0} \ln \mathcal{D}_1 = B_2 w_2^2 + B_3 w_2^3 + \dots$$

$$\pi = RT \frac{w_2}{M_2} + RT (B_2 w_2^2 + B_3 w_2^3 + \dots)$$

w_2 (g/l)	π (atm)	$\frac{\pi}{w_2}$ (atm/g l ⁻¹)
10	0,011	0,0011
20	0,024	0,0012
30	0,039	0,0013

$$\frac{\pi}{w_2} = \frac{RT}{M_2} + R \cdot T \cdot B_2 \cdot w_2$$

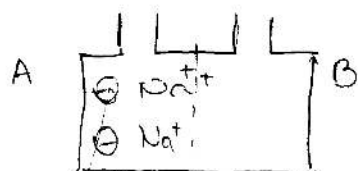


A B

A C₁ C₂

$$\pi = RT \Delta C$$

$$\Delta C = C_2 - C_1$$



$$[P^+]_A = a \quad Na^+ = ? \quad [Na^+]_A = a$$

$$\pi = RT \cdot 2a$$

Elektrolitok termodinamikája

NaCl G

$$G = \mu_{H_2O} n_{H_2O} + \mu_{NaCl} n_{NaCl}$$

Na⁺ + Cl⁻

$$G = \mu_{H_2O} n_{H_2O} + \mu_{Na^+} n_{Na^+} + \mu_{Cl^-} n_{Cl^-}$$

$$n_{NaCl} = n_{Na^+} = n_{Cl^-}$$

$$\mu_{NaCl} = \mu_{Na^+} + \mu_{Cl^-}$$

$$\mu_{Na^+} \stackrel{?}{=} [Na^+]$$

$$\mu_+ = \mu_+^\circ + RT \ln \gamma_+ c_+$$

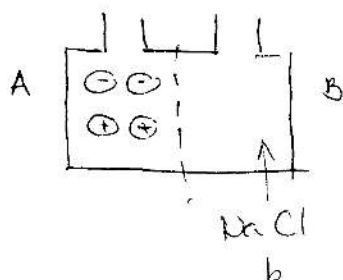
$$\mu_- = \mu_-^\circ + RT \ln \gamma_- c_-$$

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

$$\mu_{\pm}^\circ = \frac{\mu_+^\circ + \mu_-^\circ}{2} \quad \gamma_{\pm}^2 = \gamma_+ \gamma_-$$

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

Fehérje:



$$V_A = V_B$$

$$[P^\ominus] = a$$

$$[Na^\oplus] = a$$

$$\pi = R \cdot T \sum C_i$$

P. fehérje !!

$$\pi = R \cdot T \sum C_i$$

A B

$$[P^\ominus] = a \quad [P^\ominus] = 0$$

$$[Na^\oplus] = a \quad [Na^\oplus] = b$$

$$[Cl^\ominus] = 0 \quad [Cl^\ominus] = b$$

kezdet

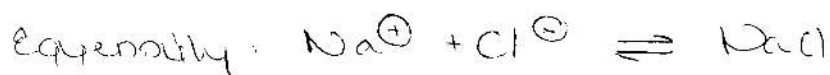
A B

$$[P^\ominus] = a \quad [P^\ominus] = 0$$

$$\Rightarrow [Na^\oplus] = a + x \quad [Na^\oplus] = b - x$$

$$[Cl^\ominus] = x \quad [Cl^\ominus] = b - x$$

oszmózis nyomát a koncentrációk különbségéből fogjuk ebben számoljuk.



$$K_d = \frac{[Na^\oplus]_A [Cl^\ominus]_A}{[NaCl]_A} = \frac{[Na^\oplus]_B [Cl^\ominus]_B}{[NaCl]_B}$$

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

$$\pi = R \cdot T ([P^\ominus]_A + [Na^\oplus]_A + [Cl^\ominus]_A - [Na^\oplus]_B - [Cl^\ominus]_B)$$

$$\pi = R \cdot T (a + a + x + x - (b-x) - (b-x)) \rightarrow \pi = R \cdot T (2a + 4x - 2b)$$

$$\boxed{[Na^+]_A [Cl^-]_A = [Na^+]_B [Cl^-]_B}$$

$$b=0 \quad \pi = R \cdot T \cdot 2a$$

$$b \gg a \quad \pi = R T a$$

φ n db Na^+

$$[Na^+]_A = na + x \quad x = -\frac{b^2}{na+2b}$$

$$\pi = R T (a + na x + x - (b-x) - (b-x))$$

DONNAN POTENCIÁL

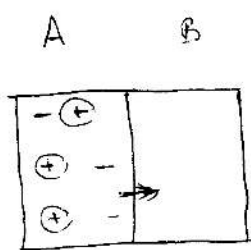
Φ μ $\Phi > 0$ munkavégzés

$\Phi < 0$

$$\frac{q}{C} = V \quad mV$$

$$W = \sum Na \cdot e \Phi = \sum z_i \cdot F \cdot \Phi \quad C = 1,6 \cdot 10^{-19}$$

$\downarrow$ munka
 $\uparrow$ zita töltés a részecskének
 Na^{+1}/H^{+1}



$$A \quad [P^-] = 10^{-5} M$$

$$[Na^+] = 10^{-5}$$

$$B \quad [Na^+] = 10^{-11} M$$

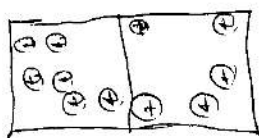
$$O \quad \Phi = 0$$

$$O \quad W = \Phi_B = 0$$

$$W = \Phi_A = 0$$

$$\Delta \Phi = \Phi_B - \Phi_A$$

$$\Delta \Phi_D = \Phi_B - \Phi_A = 360 mV$$



μ^- = elektrokémia potenciál

$$\bar{\mu}_+ = \left(\frac{\partial G}{\partial n_+} \right)_{T, P, n_-}$$

$$\mu_+ = \mu^+ + R T \ln \gamma_+ C_+ + \sum z_i F \Phi$$

$$(\bar{\mu}_+)_{\text{A}} = (\bar{\mu}_+)_{\text{B}}$$

$$(\bar{\mu}_+)_{\text{B}} = \mu_{\text{B}}^{\circ}(\text{P}) + RT \ln (\gamma_+ C_+)_{\text{B}} + z_j F \Phi_{\text{B}}$$

$$-(\bar{\mu}_+)_{\text{A}} = \mu_{\text{A}}^{\circ}(\text{P} + \text{H}) + RT \ln (\gamma_+ C_+)_{\text{A}} + z_j F \Phi_{\text{A}}$$

$$0 = 0 + RT \ln \frac{(\gamma_+ C_+)_{\text{B}}}{(\gamma_+ C_+)_{\text{A}}} + z_j F (\Phi_{\text{B}} - \Phi_{\text{A}})$$

$$\Phi_{\text{B}} - \Phi_{\text{A}} = \Delta \Phi = -\frac{RT}{z_j F} \ln \left[\frac{(\gamma_+ C_+)_{\text{B}}}{(\gamma_+ C_+)_{\text{A}}} \right]$$

$$10^{-5} \text{ M} \quad \gamma_+ \rightarrow 1$$

$$\Delta \Phi = -\frac{RT}{z_j F} \cdot \ln \left[\frac{(C_+)_{\text{B}}}{(C_+)_{\text{A}}} \right]$$

$$C_{+\text{A}} = 10^{-5} \text{ M}$$

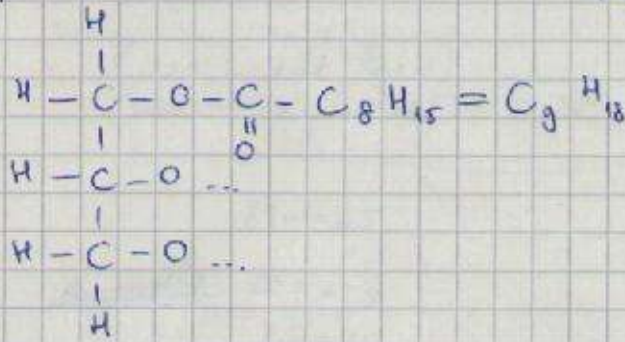
$$C_{+\text{B}} = 10^{-11} \text{ M}$$

behalten

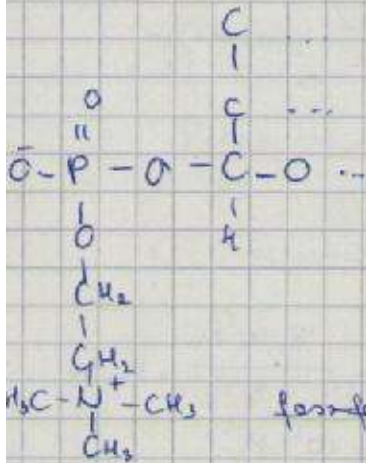
$$\underline{\underline{\Delta \Phi = 360 \text{ mV}}}$$

X1.18.

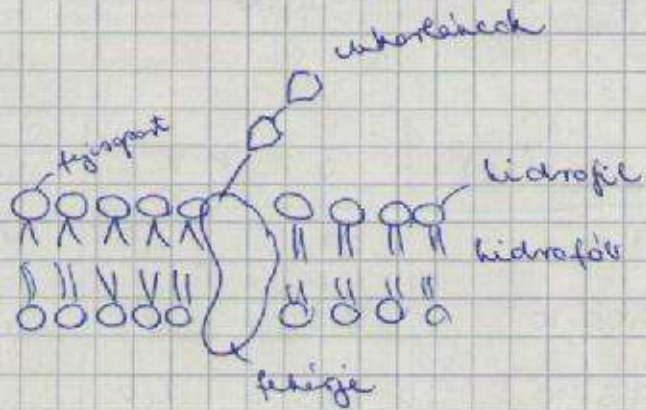
8. eladás



triglicerid

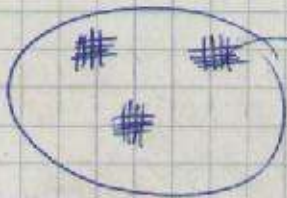


fosfatidicholin



cukorláncok:
felismeri a neuront
ha nem vagyát → károsodás

lila tavak ← lila baci



X-ray diffrakció

2D KD

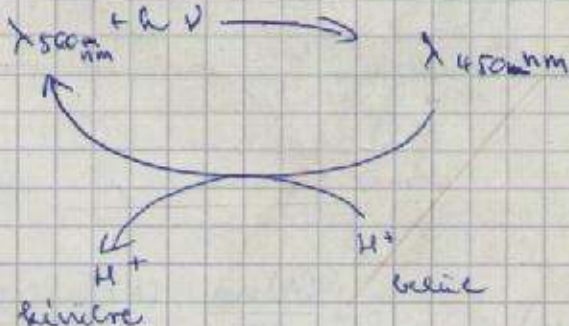


bakterio rodopszin

2D kristályok

Trimerek

hidrofób környezet → α -hélix alakba kerül



bedigpródiák a membrán
hidrofób környezetbe

ΔpH
múgyfogás ($h\nu$) → ΔpH →

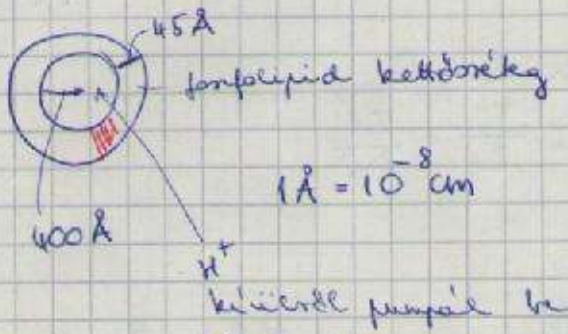
$$\text{pH} = -\log[\text{H}^+]$$

→ $\Delta \phi$ → ATP szintézis

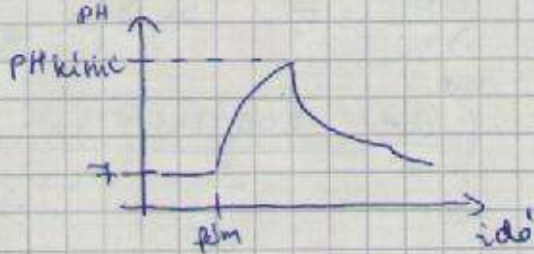
má iannanaka
 10^{-14}

lecitin + $n/2$ + NaCl - szilikoláz + libor foltsak

szekpülsak



$$1 \text{ Å} = 10^{-8} \text{ cm}$$



$$([H^+]_{\text{sebbe}} - [OH^-]_{\text{kint}}) \cdot V_{\text{sebbe}} =$$

$$= ([OH^-]_{\text{kint}} - [H^+]_{\text{kint}}) \cdot V_{\text{kint}}$$

$$[\text{vesikulum}] = 5 \cdot 10^{-9} \frac{\text{mol}}{\text{e}}$$

$$V_{\text{sebbe}} = \frac{n}{3} \pi (400 \cdot 10^{-8} \text{ cm})^3 \cdot (6,02 \cdot 10^{23} \frac{\text{ver}}{\text{mol}}) \cdot 5 \cdot 10^{-9} \frac{\text{mol}}{\text{e}} =$$

$$= 0,81 \frac{\text{cm}^3}{\text{e}}$$

$$V_{\text{kint}} = 999,19 \frac{\text{cm}^3}{\text{e}}$$

$$\text{pH } 9,0 \quad [H^+] = 10^{-9} \text{ M} \quad [H^+][OH^-] = 10^{-14}$$

$$[OH^-]_{\text{kint}} = 10^{-5} \text{ M}$$

$$\text{pH}_{\text{kint}} 1,9 \quad [H^+]_{\text{kint}} = 1,23 \cdot 10^{-2} \text{ M}$$

proton / vesikulum

$$H^+ = V_{\text{sebbe}} \cdot C_{H^+} \cdot N_A = \frac{4}{3} \pi (400 \cdot 10^{-8} \text{ cm})^3 \cdot (10^{-11} \frac{\text{mol } H^+}{100 \text{ cm}^3}) \cdot$$

$$\cdot (6,23 \cdot 10^{23} \frac{\text{molekula}}{\text{mol}}) \Rightarrow 2000 H^+ \text{ vesikulánként}$$

Coulomb-törvény

$$F = \frac{Z_1 \cdot Z_2}{D r^2}$$

elektromos térerő

$$E = \frac{F}{Z_2} = \frac{Z_1}{D r^2}$$

potenciál

$$-\frac{\partial \phi}{\partial r} = E \Rightarrow \partial \phi = -\frac{Z_1}{D r^2} dr$$

$$\phi_{\text{hint}} - \phi_{\text{kint}} = \frac{-2000 \text{ lel}}{D}$$

$$\int_{\text{kint}}^{\text{hint}} \frac{dr}{r^2} = \frac{2000 \text{ lel}}{D} \left(\frac{1}{r_{\text{kint}}} - \frac{1}{r_{\text{hint}}} \right) =$$

$$1 \text{ el} = 4,803 \cdot 10^{10} \text{ esu} \quad (\text{electrostatic unit})$$

$$r_{\text{kint}} = 400 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

$$r_{\text{hint}} = 445 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

$$1 \text{ esu/cm} = 300 \text{ Volt}$$

$$D_{\text{lipid}} \sim 30$$

$$= -210420 - 0,242 \text{ V} = -242 \text{ mV}$$

$$\frac{0,242 \text{ V}}{45 \cdot 10^{-8} \text{ cm}} = 500.000 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$$



$$3. \quad C_{\text{DMS}} = 1 \frac{\text{mg}}{\text{ml}}$$

$$T = 25^\circ \text{C}$$

$$C_{\text{NaCl}} = 0,001 \text{ M}$$

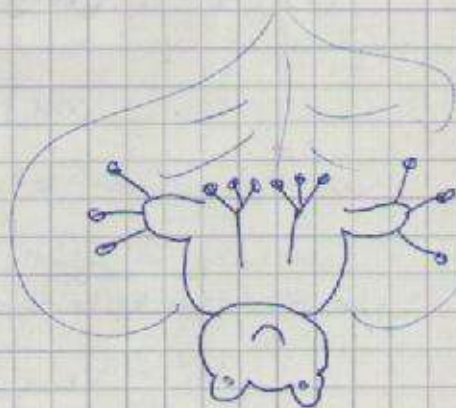
$$M_{\text{NaCl}} = 340 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$\frac{1}{340} = 2,94 \cdot 10^{-3} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$\Delta \phi = \frac{2T}{zF} \cdot \ln \frac{a+b}{b} = 35,2 \text{ mV}$$

$$4. \quad n = 1$$

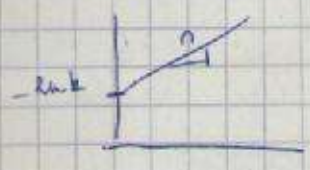
$$K_a =$$



mm2

$$v = -k [A]^n$$

$$\ln v = -\ln k + n \ln [A]$$



$$n = 0,5$$

$$k = 0,2 \frac{\mu M^{0,5}}{min}$$

$$\mu = \mu_0 + kT \ln X_{mix}$$

2.

5.

$$\frac{\bar{v}}{[K]} e^{2\psi z_2} = n K_{int} - \bar{v} K_{int}$$

$$K_{int} = 10^6 M^{-1}$$

$$n = 14$$

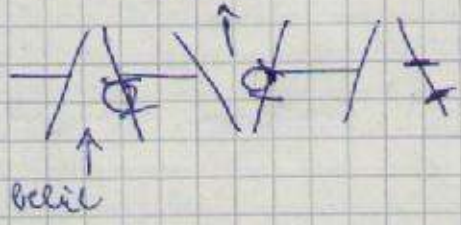
9. előadás

XI. 25.

Membrán ~~trans~~ transport

- passzív
 - diffúzió
 - fehére követítés
 - csatoma
 - feszültségfüggő
 - mechanoszenzitív
 - ligandumfüggő

• kamier



μ. glükóstransporter

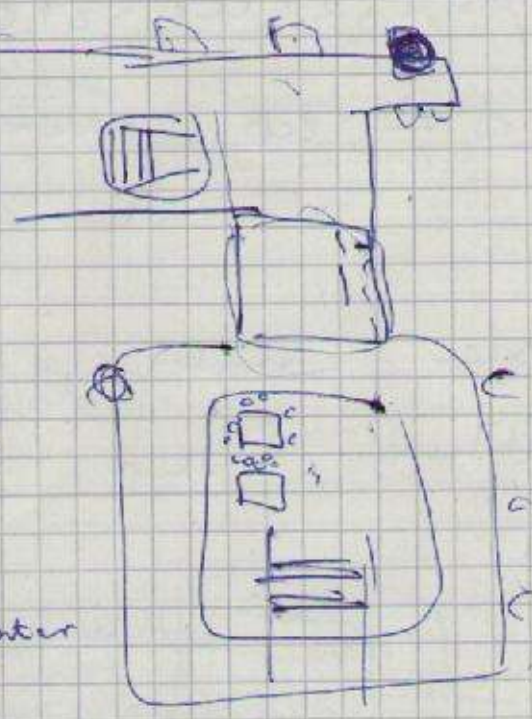
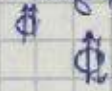


külső külső
adj

kapcsolat

- uniporter
- szimporter
- antiporter

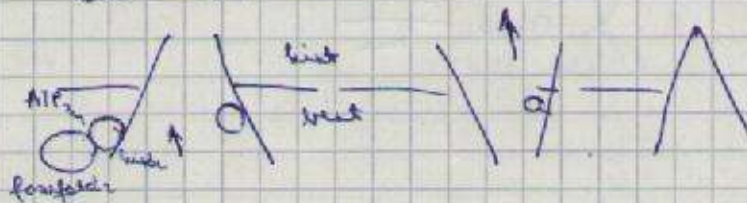
1. anyagot szállít



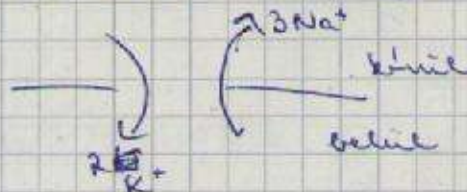
- aktív

- primer pumpák
- ATP
- P-típusú
- V-típusú

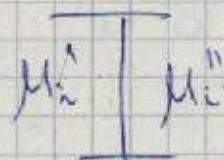
Ca^{2+} - ATP-áz



$\text{Na}^{+} - \text{K}^{+}$ - ATP-áz



$$\left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, P, n_j \neq n_i} = \mu_i$$



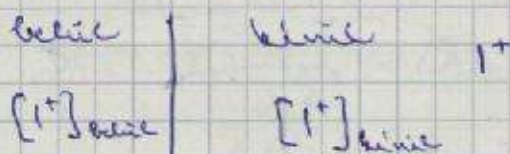
$$\mu = \mu^{\circ} + RT \ln a \quad a = c$$

$$\mu = \mu^{\circ} + RT \ln c + zF\phi$$

elektrokémiai pot.

$$\phi = \frac{J}{c} \quad zc\phi \quad cNa = F$$

↑
ezt a két oldalon egyenlőnek kell lenni



I^{+} szabadon áramlik

$$\mu_{\text{bent}} = \mu_{\text{bent}}^{\circ} + RT \ln [I^{+}]_{\text{bent}} + zF\phi_{\text{bent}}$$

$$\mu_{\text{kint}} = \mu_{\text{kint}}^{\circ} + RT \ln [I^{+}]_{\text{kint}} + zF\phi_{\text{kint}}$$

$$\mu_{\text{kint}}^{\circ} = \mu_{\text{bent}}^{\circ}$$

$$RT \ln [I^{+}]_{\text{bent}} + zF\phi_{\text{bent}} = RT \ln [I^{+}]_{\text{kint}} + zF\phi_{\text{kint}}$$

$$\Delta\phi = \phi_{\text{bent}} - \phi_{\text{kint}}$$

$$RT \ln \frac{[I^+]_{\text{belső}}}{[I^+]_{\text{külső}}} + z F \Delta \phi = 0$$

$$\Delta \phi = - \frac{RT}{zF} \ln \frac{[I^+]_{\text{belső}}}{[I^+]_{\text{külső}}} = \frac{RT}{zF} \ln \frac{[I^+]_{\text{külső}}}{[I^+]_{\text{belső}}} \quad \text{Nernst - egyenlet}$$

$$[K^+]_{\text{belső}} = 100 \text{ mM} = 0.1 \text{ M}$$

$$[K^+]_{\text{külső}} = 4 \text{ mM} = 0.004 \text{ M}$$

$$T = 20^\circ \text{C} = 293 \text{ K}$$

$$\phi = \frac{RT}{zF} \ln \frac{[K^+]_{\text{külső}}}{[K^+]_{\text{belső}}} = \underline{\underline{-89 \text{ mV}}}$$

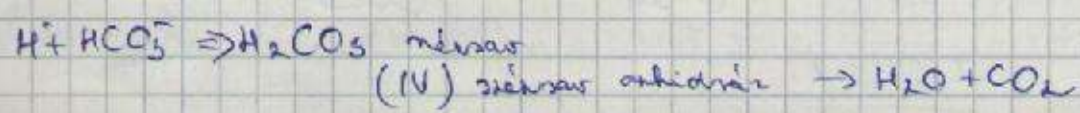
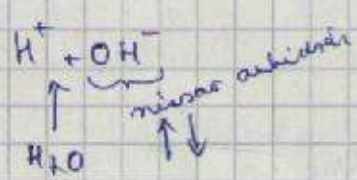
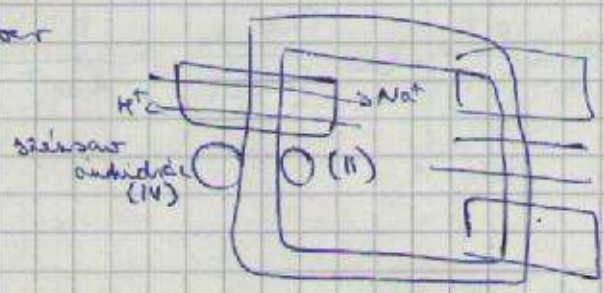
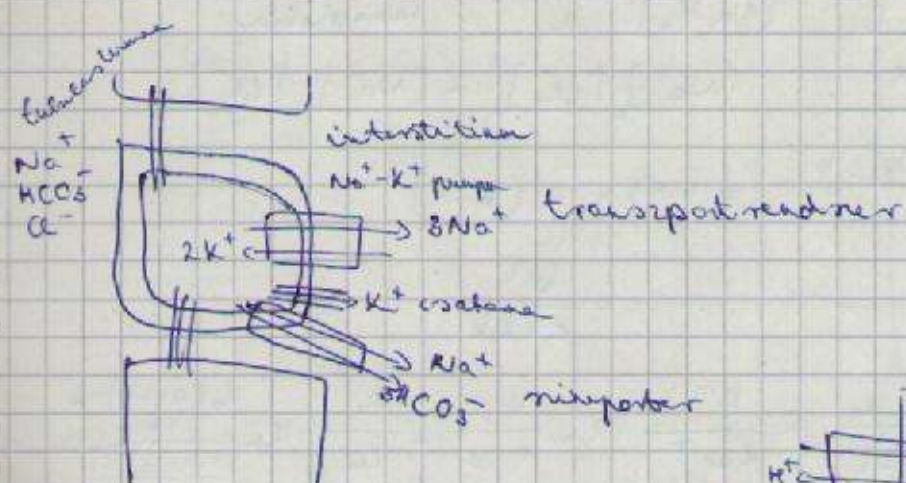
$$\Delta \phi_{\text{Na}^+ \text{ egy}} = 56 \text{ mV}$$

$$\Delta \phi_{\text{cella egy}} = -60 \text{ mV}$$

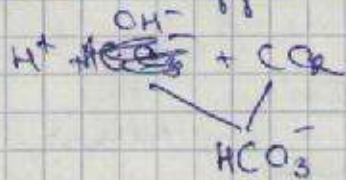
P_K : K^+ permeabilitás

P_{Na} : Na^+ permeabilitás

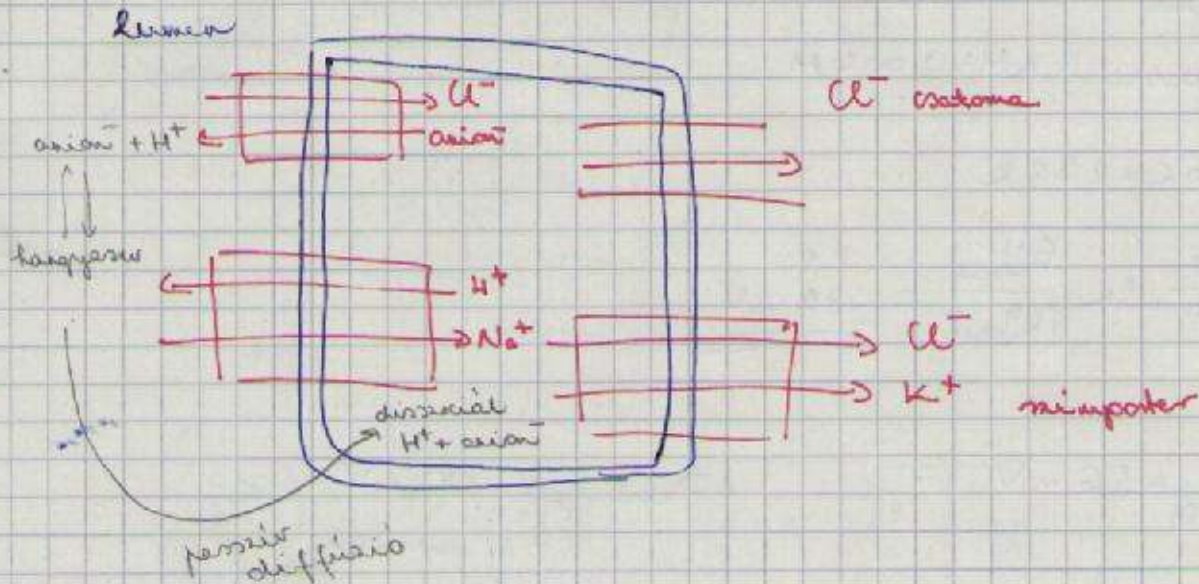
$$E_m = \frac{RT}{zF} \ln \frac{P_K [K^+]_{\text{külső}} + P_{Na} [Na^+]_{\text{külső}}}{P_K [K^+]_{\text{belső}} + P_{Na} [Na^+]_{\text{belső}}} \quad \text{nyugalmi potenciál}$$



passzívon bevezet a szilke (CO_2)



- kiegészítő Na^+ , HCO_3^- szállítás



es de anioniblen R₂Tj₂ a Cl⁻ erstatuât

integer

$L \xrightarrow{+} p$

Green

	Na^+	Cl^-	Na^+	Cl^-
r	a	a	b	b
d	0	x	-x	-x
evening	a	a	b	b

Geminarium

$$\Delta\phi = \phi_L - \phi_R$$

$[NaH_6] = a$ hemoglobin

$$[Na^+][Cl^-] = [Na^+]_s [Cl^-]_s$$

$$(a+x)x = (b-x)^2$$

$$x = \frac{b^2}{a+2b}$$

$$\Delta \phi_{Na^+} = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{[Na^+]_e}{[Na^+]_i} = \frac{RT}{z_{Na^+} F} \cdot \ln \frac{b-x}{a+x} = \frac{RT}{z_{Na^+} F} \cdot \ln \frac{\frac{b(a+2b)-b^2}{2ba}}{\frac{a(a+2b)+b^2}{a+2b}} = \frac{RT}{z_{Na^+} F} \cdot \ln \frac{b}{a+b}$$

$$A \phi_{\text{ce}} = \frac{RT}{z e^{-F}} \cdot \ln \frac{[\text{ce}]_o}{[\text{ce}]_i} = (\dots) \ln \frac{b-x}{x}$$

$$\Delta \phi_{\text{net}} = \Delta \phi_{\text{w}}$$

$$\Delta\phi = -80 \text{ mV} \quad T = 20^\circ\text{C} = 293 \text{ K}$$

(2)

$$[K^+]_{\text{ext}} = 200 \mu\text{M}$$

$$\textcircled{a} \quad \Delta\phi = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{[K^+]_{\text{ext}}}{[K^+]_{\text{int}}} \Rightarrow e^{\frac{\Delta\phi zF}{RT}} = \frac{[K^+]_{\text{ext}}}{[K^+]_{\text{int}}}$$

$$z = +1$$

$$[K^+]_{\text{int}} = ? \Rightarrow [K^+]_{\text{int}} = [K^+]_{\text{ext}} \cdot e^{-\frac{\Delta\phi zF}{RT}} = 200 \cdot 10^6 \cdot e^{-\frac{-80 \cdot 10^{-3} \cdot 1.90485}{8.3145 \cdot 293}} = 4,754 \cdot 10^3 \text{ M}$$

$$\textcircled{b} \quad T_2 = 40^\circ\text{C}$$

$$\frac{\Delta\phi_2}{\Delta\phi} = \frac{\frac{RT_2}{zF} \cdot \ln \frac{[K^+]_{\text{ext}}}{[K^+]_{\text{int}}}}{\frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{[K^+]_{\text{ext}}}{[K^+]_{\text{int}}}} = \frac{T_2}{T} \Rightarrow \Delta\phi_2 = \frac{T_2}{T} \cdot \Delta\phi$$

$$\Delta\phi_2 - \Delta\phi = \left(\frac{T_2}{T} - 1\right) \Delta\phi =$$

$$= \left(\frac{313}{293} - 1\right) (-80 \cdot 10^{-3}) = -5,46 \cdot 10^{-3} \text{ V}$$

$$\textcircled{3} \quad n = 5 \text{ mmol } \text{Ca}^{2+}$$

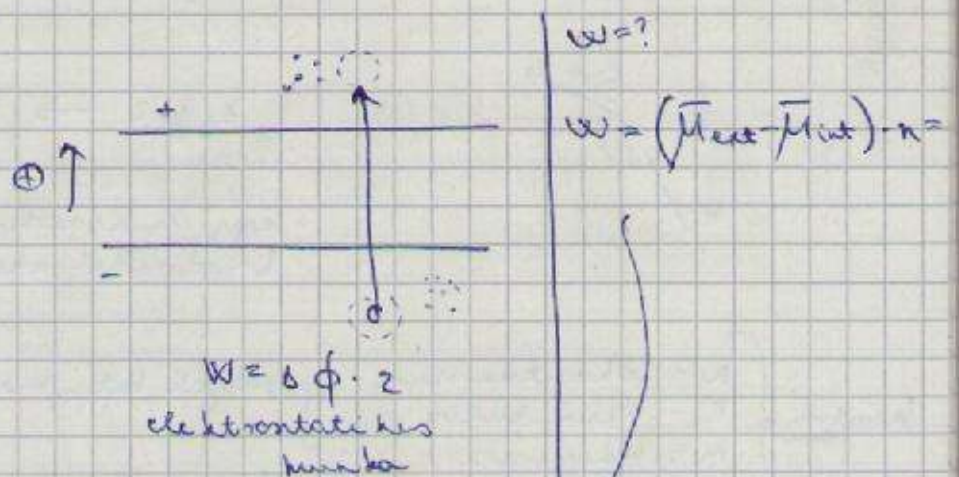
$$[\text{Ca}^{2+}]_{\text{int}} = 0,13 \mu\text{M}$$

$$[\text{Ca}^{2+}]_{\text{ext}} = 1,2 \text{ mM}$$

$$T = 37^\circ\text{C}$$

$$W = ?$$

$$\Delta\phi = -65 \text{ mV}$$



$$= (\mu_{\text{ext}} + zF\phi_{\text{ext}} - \mu_{\text{int}} - zF\phi_{\text{int}}) \cdot n =$$

$$z_{\text{Ca}^{2+}} = 2 \quad = (\mu^\circ + RT \ln [\text{Ca}^{2+}]_{\text{ext}} - \mu^\circ - RT \ln [\text{Ca}^{2+}]_{\text{int}} - zF\Delta\phi) \cdot n =$$

$$= \left(RT \ln \frac{[\text{Ca}^{2+}]_{\text{ext}}}{[\text{Ca}^{2+}]_{\text{int}}} - zF\Delta\phi \right) \cdot n = 8,3145 \cdot 310 \cdot \ln \frac{1,2 \cdot 10^{-3}}{0,13 \cdot 10^{-6}} - 2 \cdot 96485 \cdot (-65 \cdot 10^{-3}) \cdot 5 \cdot 10^{-3} = 109,16 \text{ J}$$

át felírják merkeket

Kémiai kötések

- kovalens kötések, Schrödinger - egyenlet
- a kötés energiája
- elektronpályák, atomi, molekuláris
- LCAO - módszer, hibridizáció
- peptidkötés, Ramachandran - ábrázolás
- nem kovalens kölcsönhatások
- hidrogénkötés
- hidrofób kötés
- fehérjék feltételezése (folding)

Kvantum elmélet részecske - hullám dualitás

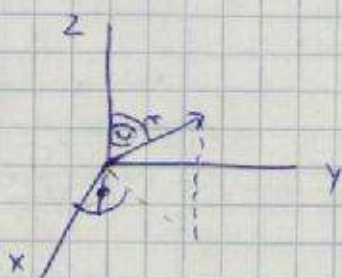
Schrödinger 1926.

ψ fu. rész fizikai értelme

$$|\psi(x, y, z)|^2 = \rho(x, y, z)$$

↑
részecske megtalálásának valószínűsége ebben a pontban

elektronpályák ρ értéke nagy



$$x, y, z \rightarrow r, \phi, \theta$$

- egy rendszerhez rendelt energia kvantált
- rendezhető egy (elektron)pályarendszer

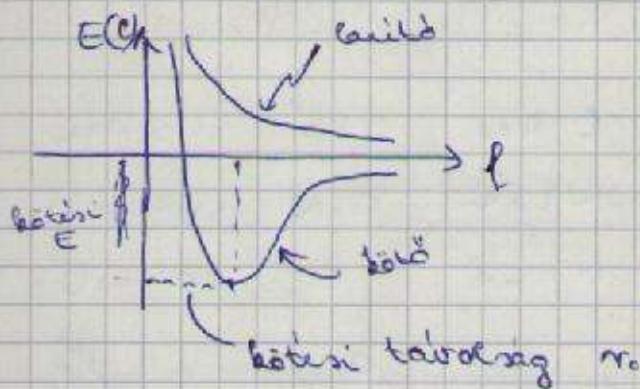
kvantumszámok $\left\{ \begin{array}{l} n - \text{főkvantumszám} \\ l - \text{azimutális} \\ m - \text{mágneses} \\ s - \text{spin} \end{array} \right\}$ pályát hat. meg (2 részecske lehet $2s + \frac{1}{2}$)
(külső mágneses térben viszonyítva)

0	atom	s	σ	σ^+
∞	→	p	π	π^+
szem.			↑ kötő	↑ lasító
			molekulák	

$$|\psi(x,y,z)|^2 = \rho(x,y,z)$$

2 megoldási sorozat

• kötőpálya
• lasítópálya

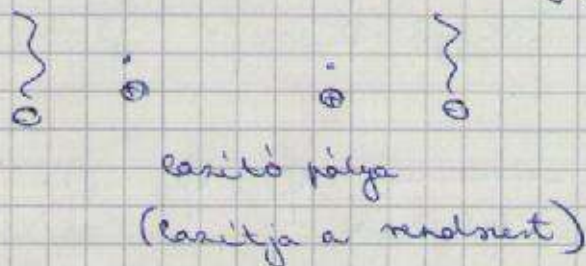


• → ← • részecské
molekula

atomi pályák $\xrightarrow{\text{LCAO}}$ molekula pályák



kovalens kötés lényege

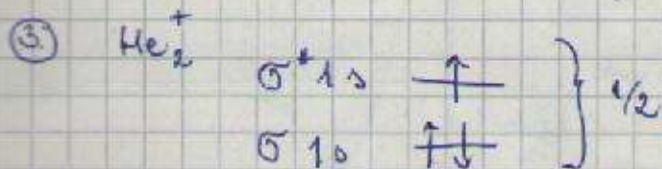
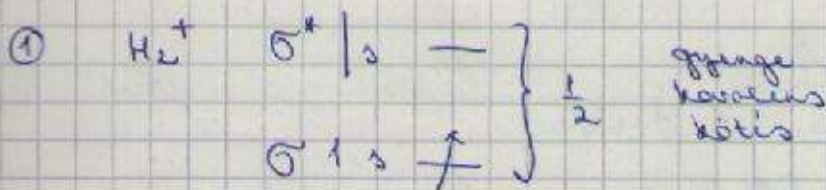


Kötés rendje

$$K. R. = \frac{e\# \text{ kötőpályán} - e\# \text{ lasítópályán}}{2}$$

$e\#$: e száma

pl.:

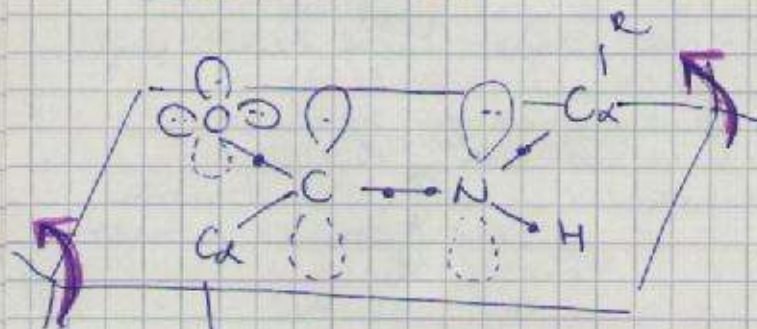


hidrogén kötés s és p pályák

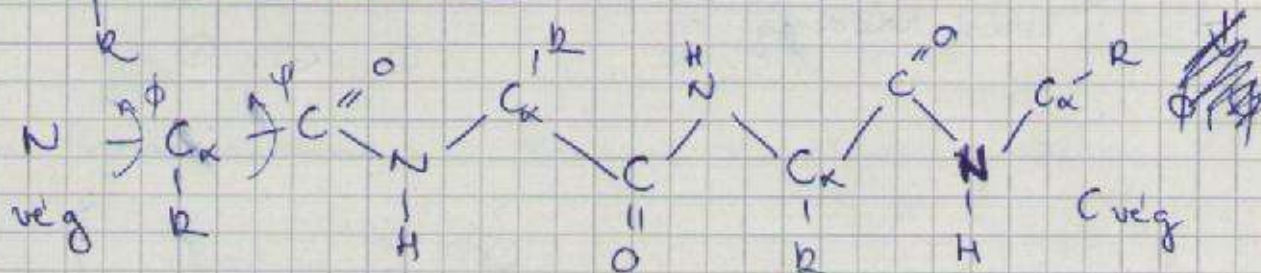
→ két peptid kötés nélkül

Peptid kötés

6 atom 1 síkban, együtt tud forgani



C = 4e $3sp^2$ 1 síkban
 N = 5e C, N $sp^2 \rightarrow \sigma$
 O = 6e O $sp^2 \rightarrow \sigma + \pi, \pi$



→ ϕ, ψ
 kérésre

N félé C félé $\phi_1, \psi_1, \phi_2, \psi_2, \dots, \phi_{n-1}, \psi_{n-1}$

① dramatikai jelöléssel ellentétes

Ramachandran - plot

ϕ, ψ szögeket ábrázolva egyaránt minden

nehézség kölcsönhatások

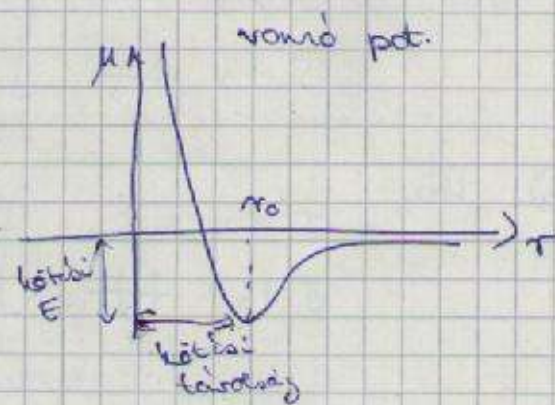
töltés, dipólus, indukált dipólus

minden mindennel: 63 félé

t-d
 t-id
 t-t
 d-d
 d-id
 id-id

poláris - apoláris

terület pot.



① Töltés - töltés

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

↑
dielektrikus állandó.

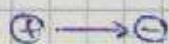
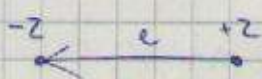


kötési energia

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

ρ : kompressziós
mérhető

dipól ~~moment~~ momentum
vektormennyiség



$$\vec{\mu} = |z| \cdot \vec{r}$$

egység: Debye



$$|\vec{\mu}| = 1,85 \text{ Debye}$$

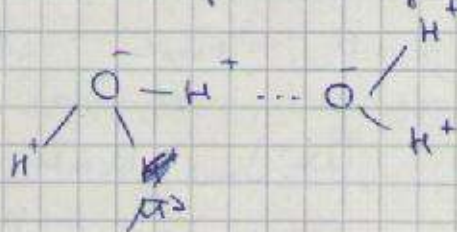
② Töltés - dipólus

$$U = - \frac{N \cdot \mu \cdot z}{D r^2}$$

③ Dipólus - dipólus

$$U = - \frac{2 N \mu_1 \mu_2}{D r^3}$$

kovalens komponens (indukált)

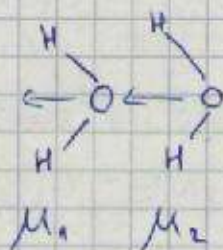


④ Van der Waals kötés

Hidrogénhid



$$\mu \sim \frac{\alpha}{r_0^6}$$



$$U_{\text{H-kötés}} = 6,7 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} = -3,5 + 1,5 + 1,7$$

dipól-dipól
kovalens
(Van der Waals)

$$K_{\text{ovalens}} \sim 100 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$$

$$\text{Törlis-löchlís} = 10 - 100^{-4}$$

$$H - \text{hid} \quad \rightarrow \quad \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$$

hidrofób effektus

hidrofób is hidrofób oldallánok

Seminárium

①
(3.)

$$T = 37^\circ\text{C} = 310\text{K}$$

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

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

$$[K^+]_{\text{hint}} = 50\text{mM}$$

$$[K^+]_{\text{bent}} = ?$$

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

Nernst egyenlet

$$\Delta\phi = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{[K^+]_{\text{hint}}}{[K^+]_{\text{bent}}}$$

$$[K^+]_{\text{bent}} = [K^+]_{\text{hint}} \cdot e^{-\frac{\Delta\phi zF}{RT}} = \underline{\underline{1\text{M}}}$$

②

$$n_{\text{Na}^+} = 1\text{mol}$$

$$\Delta\phi = -89\text{mV}$$

elektrokémiai pot (törlött vízre esik)

(4.)

$$[Na^+]_{\text{bent}} = 12\text{mM}$$

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

$$T = 37^\circ\text{C} = 310\text{K}$$

$$\mu = \mu_0 + RT \ln c + zF\phi$$

$$\Delta\phi = \phi_{\text{bent}} - \phi_{\text{hint}}$$

$$\underline{\underline{\Delta G = n \cdot \Delta \bar{G} = \mu_{\text{hint}} - \mu_{\text{bent}} = RT \ln \frac{[Na^+]_{\text{bent}}}{[Na^+]_{\text{hint}}} + zF(\Delta\phi)}}$$

$$\Delta G = G_{\text{hint}} - G_{\text{bent}} =$$

$$\phi_{\text{hint}} - \phi_{\text{bent}} = -\Delta\phi$$

$$\text{Enzim} = 1501 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

11. előadás

xii. 8.

Enzimek

Enzimkinetika

Inhibitorok

Enzim = katalizátor

• hatékonyság } meghatározzák az enzimeket a katalizátoroktól
• specifikus

enzim = fehérje

(RNS is lehet enzim)

RNS → DNS információátvitel
→ fehérjék

Kofaktor = fehérje + valami

aktív centrum
pl. fémion (Fe, Zn, Mg, Mn)
pl. kocsium (kis molekula v. komplex)

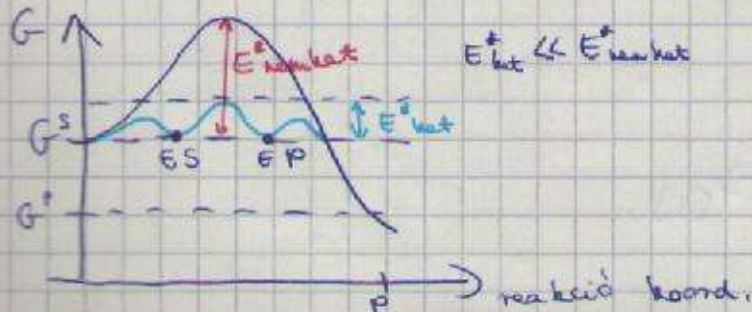
proszetikus csoport = erősen (kovalens) kötött kocsium

holoenzim – apoenzim

szubstrát $\xrightarrow{\text{enzim}}$ termék

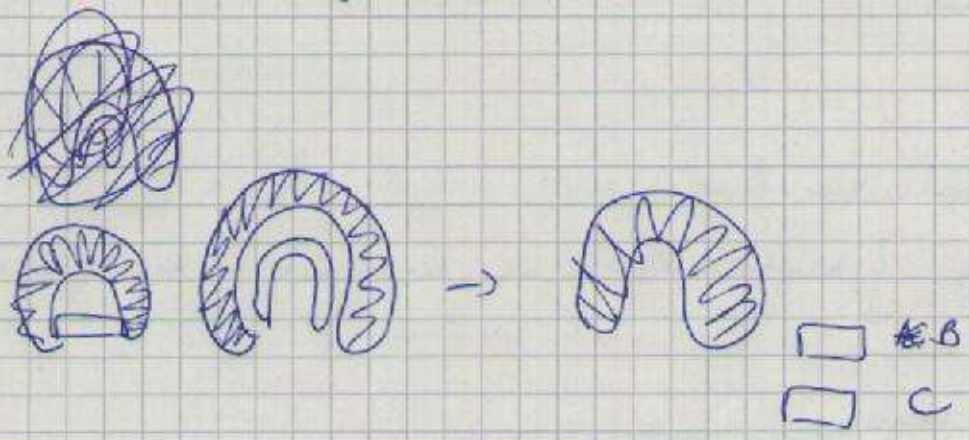
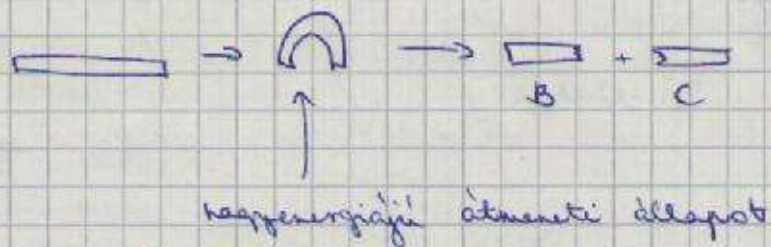
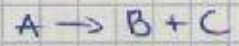
szubstrát kötő hely: úgy pozícionálja, hogy könnyen lehessen
fém az aktív centrumon

reakciókoordináta (reakció minitét tulajdonságai)



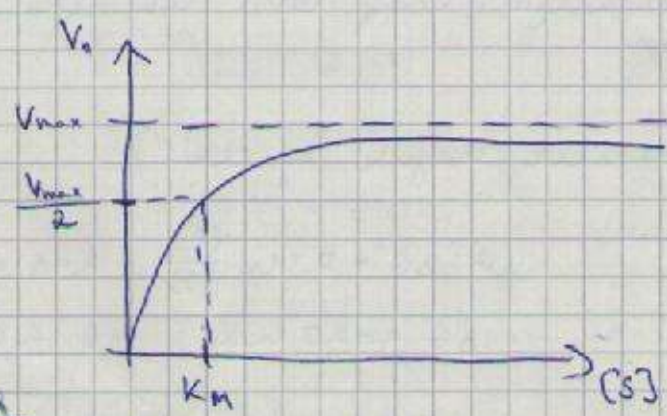
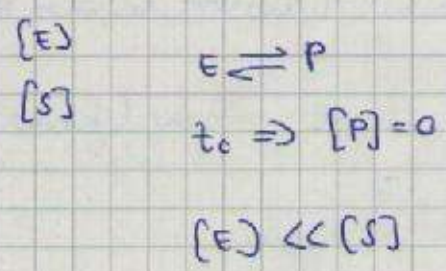
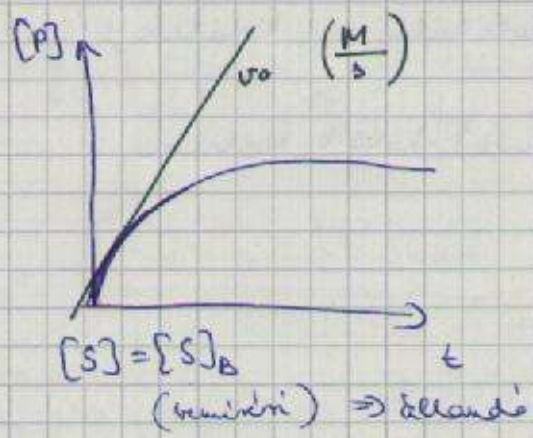
$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln \frac{[P]}{[S]} \quad k = A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT}}$$

$$\Delta G = -RT \ln k \quad \Delta G^0 < 0$$



hidrogénkötés
hidrofób kötés
ionos kölcsönhatás

- sav- és bázis katalízis
- kovalens katalízis



Michaelis konstans





sebr. nagyf. lépés
 $V_0 = k_2 [ES]$

keletkezés:

$$k_1 ([E]_T - [ES]) [S]$$

↑
 total = összes

eltávolítás

$$k_{-1} [ES] + k_2 [ES]$$

steady-state
~~steady~~ state

$$k_1 ([E]_T - [ES]) [S] = k_{-1} [ES] + k_2 [ES]$$

$$[ES] = \frac{[E]_T \cdot [S]}{[S] + \frac{k_{-1} + k_2}{k_1}} = \frac{[E]_T [S]}{K_M + [S]} \Rightarrow V_0 = \frac{k_2 [E]_T [S]}{K_M + [S]}$$

$$\boxed{V_0 = \frac{V_{max}}{K_M + [S]}} \quad \text{Michaelis - Menten egyenlet}$$

$K_M \left(\frac{k_{-1}}{k_1} \right) M$

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

$$v_0 = \frac{V_{max}}{2} \Rightarrow K_M = [S]$$

$$K_M = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1} \quad k_{-1} \gg k_2 \Rightarrow K_M = \frac{k_{-1}}{k_1} \quad \text{ES komplex dissz. dlé}$$

$$k_{-1} > k_2$$

$$V_0 = k_{cat} [ES]$$

$$k_2 = k_{cat} \quad (s^{-1})$$

$$v_{max} = k_{cat} [E]_T$$

"turnover" szám

specificitási konstans

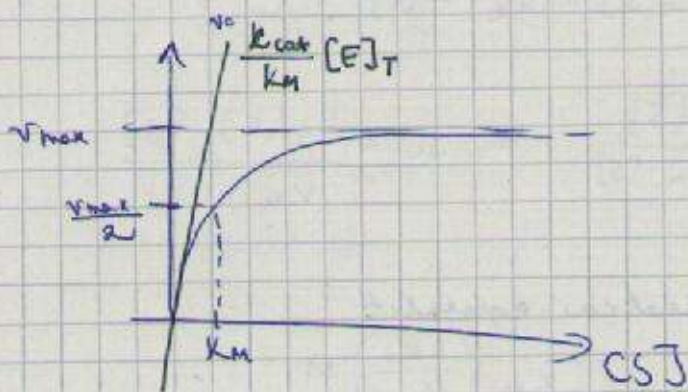
mennyi molekult alakít át

$$\boxed{\frac{k_{cat}}{K_M}}$$

Erozim

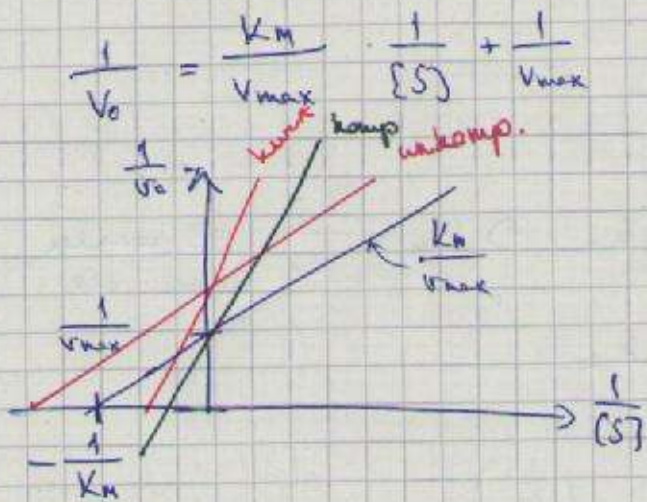
	$k_{cat} \left(\frac{1}{s} \right)$	$K_M (M)$	$\frac{k_{cat}}{K_M} \left(M^{-1} s^{-1} \right)$
erózió	0,5	$6 \cdot 10^{-6}$	$8,3 \cdot 10^3$
ribonukleáz	$7,9 \cdot 10^2$	$7,9 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^5$
kataláz	$4 \cdot 10^7$	1,1	$4 \cdot 10^7$
acetilkolin észteráz	~~$4 \cdot 10^7$~~ $1,4 \cdot 10^4$	$9 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^8$

katalitikus
tökéletesség ♡
♡
♡



$$[S] \ll K_M$$

$$v_0 = \frac{k_{cat} [E]_T [S]}{K_M + [S]}$$



Lineweaver - Burk plot

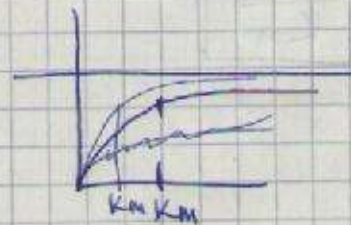
Inhibitorok

- 1.) reverzibilis
- 2.) irreverzibilis



kompetitív aktív helyre köt
uncomp. ES komplexes köt
nem az aktív helyre
kötődik csak ES komps.

kompetitív inhib. K_M nő





1. $[K^+]_{\text{seul}} = 140 \text{ mM}$ $T = 37^\circ\text{C}$

$[K^+]_{\text{kint}} = 5 \text{ mM}$

$\Delta\phi = ?$ (mekkora potenciálkültség lesz a membrán két oldalán)

Nernst-egyenlet

$$\Delta\phi = \Delta\phi_{\text{seul}} - \Delta\phi_{\text{kint}} = \frac{RT}{zF} \ln \frac{[K^+]_{\text{kint}}}{[K^+]_{\text{seul}}} = \frac{8,314 \cdot 310}{1 \cdot 96500} \ln \frac{5}{140} =$$

$z = +1$

~~$= 0,0267 \cdot 10^3$~~

$= 0,0267 \cdot (-3,33) = \underline{\underline{-0,0889 \text{ V}}}$

2. Na^+ / K^+ ATP-áz

1 mol Na^+

$[\text{Na}^+]_{\text{seul}} = 12 \text{ mM}$

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

Mekkora munkát végez, ha 1 mol Na^+ -t pumpál?

$$\Delta G = \underbrace{\bar{\mu}_{\text{kint}} \cdot n}_{\text{Gyűjt}} - \underbrace{\bar{\mu}_{\text{seul}} \cdot n}_{\text{Szűkít}} = (\bar{\mu}_{\text{kint}} - \bar{\mu}_{\text{seul}}) \cdot n =$$

$$= (\mu_0 + RT \ln [\text{Na}^+]_{\text{kint}} + zF\phi - \mu_0 + RT \ln [\text{Na}^+]_{\text{seul}} - zF\phi) \cdot n =$$

$$= \left(RT \ln \frac{[\text{Na}^+]_{\text{kint}}}{[\text{Na}^+]_{\text{seul}}} - zF(\phi_{\text{kint}} - \phi_{\text{seul}}) \right) \cdot n = \left[8,314 \cdot 310 \ln \frac{145}{12} - 1 \cdot 96500 \cdot \right.$$

$$\left. (-0,0889) \right] \cdot 1 \text{ mol} = \underline{\underline{15,01 \text{ kJ}}}$$