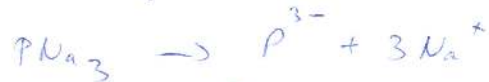


- 1) Egy fehérjéből, amelynek molekulatömege  $M_w = 60 \text{ kDa} = 60000 \text{ g/mol}$ ,  $\alpha = 30 \text{ g/l}$  koncentrációjú oldatot készítünk  $T = 37^\circ\text{C}$
- a) Mekkora az oldat ionerőssége, ha egy fehérjemolekulára  $n=3 \text{ Na}^+$  iont adtunk?

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



$$c_{\text{fehérje}} = \frac{30 \text{ g/l}}{60000 \text{ g/mol}} = 5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{l}}$$

$$c_{\text{Na}^+} = 3 \cdot 5 \cdot 10^{-4} \text{ M}$$

$$I = \frac{1}{2} (5 \cdot 10^{-4} \cdot 9 + 3 \cdot 5 \cdot 10^{-4} \cdot 1) = \underline{\underline{3 \cdot 10^{-3} \text{ M}}}$$

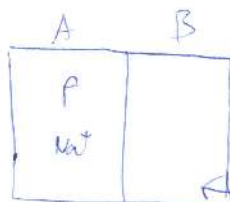
- b) Mekkora az oldat ozmózisnyomása tanta vízzel szemben?

$$R = 0,08206 \frac{\text{latm}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$\Pi = R \cdot T \cdot c = R \cdot T \cdot (n+1) \cdot c_{\text{fehérje}} = \underline{\underline{5,09 \cdot 10^{-2} \text{ atm}}}$$

↓  
leadott  $\text{Na}^+$ -ionok számán

- c) Mekkora az oldat ozmózisnyomása  $c_{\text{NaCl}} = 0,001 \text{ M}$ -os NaCl-dal szemben?



↑  
n molár Na<sup>+</sup> ledőzomunk

ide tesszük a 0,001 M NaCl - oldatot

Na<sup>+</sup> és Cl<sup>-</sup> át tud menni a membránon.

|                 | A       | B   |
|-----------------|---------|-----|
| P               | a       | 0   |
| Na <sup>+</sup> | n·a + x | b-x |
| Cl <sup>-</sup> | x       | b-x |

amit ledőztünk

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

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

$$nax + x^2 = b^2 - 2bx + x^2$$

$$nax + 2bx = b^2$$

$$x(na+2b) = b^2$$

$$\boxed{x = \frac{b^2}{na+2b}}$$

Az oszmózisnyomások különbségére vagyunk kíváncsiak.

$$\pi = R \cdot T \cdot \Delta C$$

~~$$\pi = R \cdot T \cdot \left( \frac{a + n \cdot a + x}{V} + \frac{x}{V} - \frac{(b-x)}{V} - \frac{(b-x)}{V} \right)$$~~

$$\pi = R \cdot T \cdot \left( \underbrace{a}_{c_A} + \underbrace{n \cdot a}_{n \cdot c_A} + \underbrace{x}_{c_A} + \underbrace{x}_{n \cdot c_B} - \underbrace{(b-x)}_{c_B} - \underbrace{(b-x)}_{c_B} \right)$$

~~$$\pi = R \cdot T \cdot \frac{a + na + 4x - 2b}{na + 2b}$$~~

$$\pi = R \cdot T \cdot \frac{n^2 a^2 + 2nab + 4x^2 + 2nab - 2nab - 4b^2 + 4b^2}{na + 2b}$$

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

2) Egy fehérjéről, amelynek molekulatömege  $M_w = 80000$  g/mol, oldat készítettünk  $T = 20^\circ\text{C}$ -on,  $w = 20$  g/l koncentrációval. Ismeretlen koncentrációjú NaCl-oldattal melegen dializáltuk és mérjék a fellépő Donnan-potenciál értéket, ami  $\Delta\phi = 20$  mV. Milyen koncentrációjú volt a NaCl oldat?

$$\phi = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{[Na^+]_A}{[Na^+]_B} = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{na + x}{b - x}$$

$$= \frac{RT}{zF} \ln \frac{n^2 a^2 + 2nab + b^2}{bna + 2b^2 - b^2} = \frac{RT}{zF} \ln \frac{(na+b)^2}{b(na+b)}$$

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

$n=5 \text{ Na}^+ + \text{adék}, \quad b=?$

$$\frac{q}{m} \cdot x \cdot \frac{m}{c}$$

$$b = \frac{n \cdot a}{e^{\frac{\Delta\phi z F}{RT}} - 1}$$

$$\Delta\phi = \frac{RT}{zF} \ln \frac{c_A \gamma_A}{c_B \gamma_B} = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{x}{b-x} = \frac{RT}{zF} \ln \frac{b^2}{bna + 2b^2 - b^2}$$

$$= \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{b}{n(na+b)} = \frac{RT}{zF} \cdot \ln \frac{b}{na+b}$$

A oldalon legyen a fehérje, B-ben a só, mindig legyen oldószer! legyen a Donnan-potenciál!

3) Mivel a Debye-Hückel elmélet nem ad pontos értéket, a következő közelítést használjuk:

$\text{Na}_2\text{SO}_4$  oldatban

$$\lg \gamma_{\pm} = -0,51 \cdot |z_+ z_-| \cdot \sqrt{I}$$

$$I = \frac{1}{2} \cdot \sum_i c_i z_i^2 = \frac{1}{2} (0,03 \cdot 4 + 0,06) = 0,094$$

$$c_{\text{SO}_4^{2-}} = 0,03 \text{ M}$$

$$c_{\text{Na}^+} = 0,06 \text{ M}$$

$$\lg \gamma_{\pm} = -0,51 \cdot 2 \cdot 0,3 \approx -0,306$$

$$\gamma_{\pm} = 0,494$$



## Többszörös egyensúly

Scatchard ábrázolás

A nemlinearitás okai

3. Debye-Hückel hata's

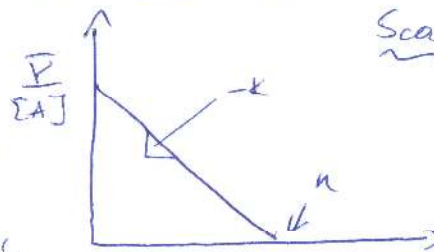
4. Közhelyek kooperativitása

Hill-egyenlet

$$\bar{Y} = \frac{nK[A]}{1 + K[A]}$$

$K$ : asszociációs állandó  
 $n$ : a közhelyek száma

$K_A = \frac{1}{K_p}$  ← disszociációs állandó



Scatchard-ábrázolás

az lineáris,  $\bar{Y}$  ha

- független } közhelyek
- azonos }
- nincs kötődés

A való életben nem nagyon van ilyen rendszer.

## Nemlinearitás okai

1) Közhelyek heterogenitása

1) 2 tengelymetszet, 2 meredekség lesz

1 nagyságrend különbség: 10%-os hiba  
 2 v. több

2) Töltés, Donnan-potenciál

Membrán az egyensúlyi dialízis kísérletnél

A felhő felismerési köztől csopontok alakulnak le

⇒ Donnan-potenciál a katasztrofális mentén

Elektrolit hozzáadásával lehet ezt mérlegetni,  
 de akkor is hibát okoz.

Ha nem köti a felhő a ligandumot, akkor is eltérő  
 lesz a koncentráció a két oldalon

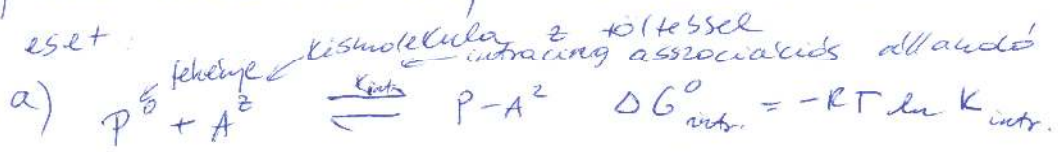
3) Debye-Hückel hata's

rétegstékelt korott elektrosztatikus kölcsönhatások

⇒ az egyenleteket korrigálni kell

⇒ aktivitás bevezetése, aktivitási koefficiens (1, ha ideális a rendszer), az ideális esettől való eltérés nagyságát jelenti

2. 25.2+ :  $\text{leukine} \leftarrow \text{bismolekula} \text{ \& } \text{Kittessel} \leftarrow \text{intracing associacids all'audd'}$



Iszeletramos pont: ekkor a felerje a kellest hordoz.

|| izoelektronos ponton ábrázolva a vendéget a fehérek  
kiszáradnak, összefogadnak, tehát nem ordog,  
a fehérekkel izoelektronos ponton dolgozni.



$$\Delta G^\circ_{\text{meqf}} - G^\circ_{\text{intr.}} = \phi(a) \cdot \underset{\uparrow}{z} \cdot \underset{\uparrow}{e} \cdot \underset{\nwarrow}{N_A}$$

a  
mal-  
Sagban a potencial,  
ahol a felhőre sugara

$$RT \ln \frac{K_{\text{unact}}}{K_{\text{intr}}} = -\phi(a) z e \mathcal{N}$$

$$K_{\text{eff}} = K_{\text{intr}} \cdot e^{-\frac{z \cdot e \cdot N \cdot \phi(a)}{RT}}$$

Ukraina v berka yeni konil

Elektrolit odabera a porovnať

$$\phi(a) = \frac{ze}{\partial a} e$$

$z \in \mathbb{C}$   
 $-X \in \text{Kappa}$   
 $\uparrow$   
 $\text{dual. all.}$     $\swarrow$     $\text{Sugar}$     $\searrow$   
 $\text{elem}$

$$W = \frac{N \cdot e^2}{2} \cdot \frac{e^2 \lambda}{RT}$$

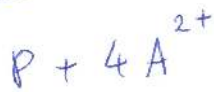
$$\Rightarrow K_{\text{meff.}} = Z_{\text{intr.}} \cdot e^{-\frac{z \epsilon N \phi(a)}{RT}} = K_{\text{intr.}} \cdot e^{-\frac{2wz}{RT}}$$

$$w = \frac{N \cdot e^2 \cdot D \cdot a}{2RT} \approx 0,1 \text{ K} \quad \text{Könnte aber auch 1 sein!}$$

$\Rightarrow$  a Coulomb-ekvivalent filtera' dik <sup>attardo</sup>  
a vegeta' merfien.

// Azaz a munkát elvégzős, amikor a két töltést közelítően egykialakhoz.

Pelda



$$Z = +2$$

A felhívja legyen azoelektronos ponton!  
Miként befolyásolja  $Z$  a  $k_{\text{megf.}}$  értéket?

|            |     |                               |
|------------|-----|-------------------------------|
| 1. A kötés | $Z$ | $k_{\text{megf.}} =$          |
|            | 0   | $1,00 \cdot k_{\text{intr.}}$ |
| 2. A kötés | $Z$ | $k_{\text{megf.}} =$          |
|            | +2  | $0,45 \cdot k_{\text{intr.}}$ |
| 3. A kötés | $Z$ | $0,20 \cdot k_{\text{intr.}}$ |
| 4. A kötés | +4  |                               |
|            | $Z$ | $0,09 \cdot k_{\text{intr.}}$ |
|            | +6  |                               |

↓  
csökken

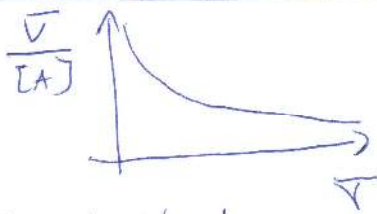
$$\omega \approx 0,1 = \frac{N \cdot e^2}{2D \cdot a} \cdot \frac{e^{-\kappa a}}{\kappa T}$$

$$\kappa^2 = \frac{8\pi \cdot N \cdot e^2}{1000 \cdot D \cdot \kappa_B T} \cdot I$$

$$I \rightarrow \text{cm}^3$$

ionerősség

Scatchard-ábrázolás



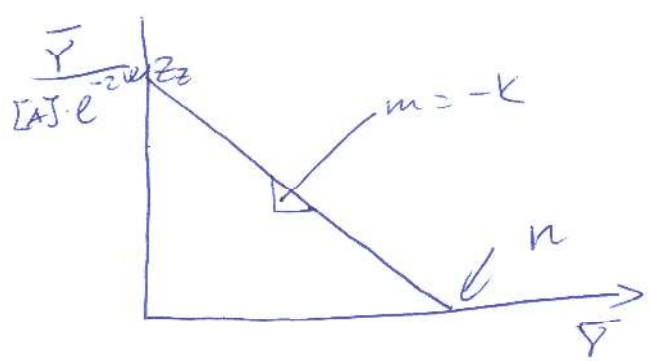
ez még nem jó  
 $\Rightarrow$  korrigálni kell

Korrekciót:

$$\bar{v} = \frac{n \cdot k_{\text{int.}} \cdot e^{-\frac{z\omega Z}{[A]}}}{1 + k_{\text{intr.}} \cdot e^{-\frac{z\omega Z}{[A]}}}$$

$$\frac{\bar{v}}{[A] \cdot e^{-\frac{z\omega Z}{[A]}}} = n \cdot k_{\text{int.}} - k_{\text{intr.}} - \bar{v}$$

Ábrázoljunk:  $\frac{\bar{v}}{[A]e^{-2wTz}}$  vs.  $\bar{v}$



Ez már szép egyenes  
 → meg tudjuk határozni  
 a teljesítmény asszociációs  
 állapotát és a  
 kötéshelyek számát.

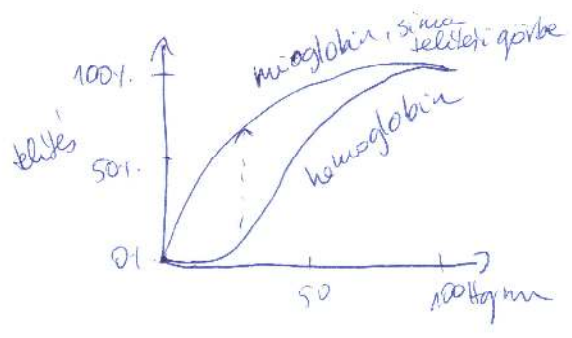
~~szív + p<sup>+</sup> → semleges  
 barikus csoport → p<sup>+</sup> + semleges  
 barikus csoport + p<sup>+</sup> → töltött lév~~

oldalakról

⊕ Belső: töltött barikus csoport

#### 4) Kooperativitás

PR. hemoglobin (Hb) - oxigén szállító 4 alegység, 4 hem, 4 polipeptidlánc, 4O<sub>2</sub> + 4K<sup>+</sup>  
 mioglobin (Mb) // cethalból, urilból // érdemes izolálni, kékjakként lemegeződik  
 met d'k tovább oxigén tárolása 1 alegység, 1 hem, 1 polipeptidlánc, 1O<sub>2</sub> + nincs kooperativitás az a kötéshelyet köt



Számpont az O<sub>2</sub> parciális nyomásánál:  
 1 atm ~ 760 Hgmm  
 Oxigén parciális nyomása: 150 Hgmm

hemoglobin nagy nyomáson telve  
 kis nyomáson leadja  
 a mioglobin kis nyomáson is le tudja adni

| Teljesít | $PO_2$ (Hgmm) | Teljesít (%) |
|----------|---------------|--------------|
| $M_b$    | 20            | 70           |
| $H_b$    | 20            | 20           |
| $H_b$    | 40            | 55           |
| $H_b$    | 50            | 80           |

Microglobin  
 $n=1$

$$\bar{V} = \frac{nK[O_2]}{1+K[O_2]}$$

$$PO_2 = \beta \cdot [O_2]$$

↑ arányossági tényező

$$\bar{V} = \frac{K' \cdot PO_2}{1+K'PO_2}$$

$$K' = \frac{K}{\beta}$$

$$50\% \text{-os teljesítmél: } \frac{1}{2} = \frac{K' \cdot P_{1/2} O_2}{1+K'P_{1/2} O_2}$$

$P_{1/2} O_2 = a_2 O_2$  parciális nyomása  
fel teljesítmél

$$K' P_{1/2} O_2 = 1$$

$$K' = \frac{1}{P_{1/2} O_2} \Rightarrow \bar{V} = \frac{PO_2 / P_{1/2} O_2}{1 + PO_2 / P_{1/2} O_2} = \frac{100 PO_2}{P_{1/2} O_2 + PO_2}$$

$$\gamma \text{-os teljesít: } \bar{V} \cdot 100$$

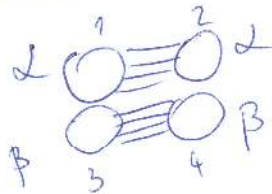
$$100 \bar{V} = \frac{100 PO_2}{P_{1/2} O_2 + PO_2}$$

Próbakörlet'sor a hemoglobin görkéjére

$$\bar{V} = \sum_{i=1}^n \frac{n_i K_i [O_2]}{1 + K_i [O_2]}$$

ez nem jó, de "kínja"  
hiperbola sosem "lenthol"  
sigmoid görkéje

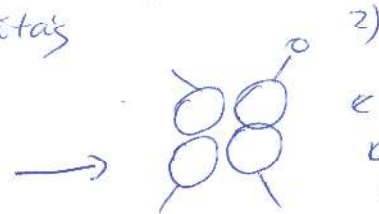
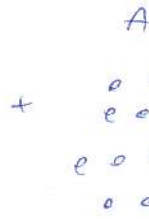
# Hemoglobin modellek



Az 2 láncból tartózik köztük  
 az α és β láncból tartózik.  
 Az első molekula oxigén kötődése a  
 másik, onnantól kevésbé nagy koncentráció  
 miatt a kötődés.

⇒ pozitív KOOPERATIVITÁS  
 ⇒ sigmoidális görbe

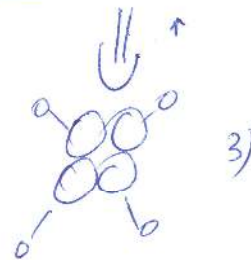
Modell: extrém pozitív kooperativitás



2)   
 = nagyon nagy  
 kötőhelyek  
 korrelációja  
 állapotban

// mindent vagy semmit elv

1. 0 oxigén van kötve  
 3. 4 oxigén van kötve



$$K = \frac{[P-A_4]}{[P][A]^4}$$

$$\bar{v} = \frac{4 \cdot K \cdot [A]^4}{1 + K \cdot [A]^4}$$

EXTREM POSITÍV  
 KOOPERATIVITÁS

⇒ sigmoid görbe

Maximális ext. érték

Az első a közt kötött van.

Mi van akkor, ha van kooperativitás, de valahol  
 a közt első kötött?

A. V. Hill

$$D = \frac{n \cdot k \cdot [A]^x}{1 + k \cdot [A]^x}$$

Hogyan kaphatjuk meg  $x$ -et?

Hill-egyenletet kell megoldanunk.

$$k \cdot [A]^x = \frac{D}{1-D}$$

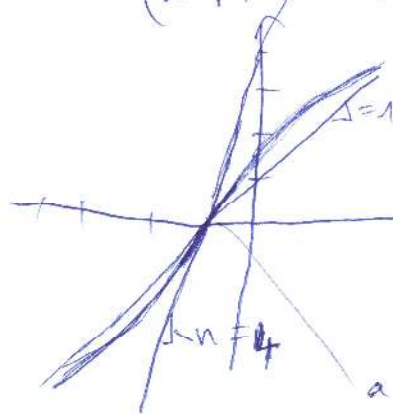
$$k \cdot [A]^x = \frac{\bar{Y}}{n - \bar{Y}}$$

$$\lg k \cdot [A]^x = \lg \frac{\bar{Y}}{n - \bar{Y}} = \lg \bar{Y} - \lg n - \bar{Y}$$

$$x \cdot \lg [A] =$$

$$\lg k + \lg [A]^x = \lg k + x \cdot \lg [A] = \lg \left( \frac{\bar{Y}}{n - \bar{Y}} \right)$$

Ábrázoljuk  $\lg \left( \frac{\bar{Y}}{n - \bar{Y}} \right)$ -t  $\lg [A]$ -al szemben!



Határoztuk meg a felvett  
részletet, az  $m=1$  és  
 $m=n$   
mértékű egyenlő  
köré kell említeni  
a görbét.

4  $\bar{Y}$  táblázat

a görbe közepe  
irányát megadja  $= x$

Hemoglobin esetében:  $x \approx 2.8$

Bohr-effektus: a hemoglobin  
oxigén kötő sigmoidja

$$1 \leq x \leq n !!!$$

$1 \leq x \leq n$  <sup>közös érték</sup>

ha  $x=1$

$\Rightarrow$  minskoop.

ha  $x=n$

$\Rightarrow$  extrém  $\oplus$

kooperatív

1) létező kémiai pot. nyomaáspingese és a víz oldat's  
teherpata tölti összekeverés

$$T = \left( \frac{\partial \mu_w}{\partial p} \right)_T \quad pV = nRT$$

$$\frac{V}{n} = \frac{RT}{p}$$

$$\int_{sta}^{n \cdot sta} d\mu_w = RT \int_{sta}^{n \cdot sta} \frac{1}{p} dp$$

$$\mu_w - \mu_w^0 = RT (\ln p - \ln p_0)$$

$$2) \quad m \quad p/p_0 \quad x_{H_2O}$$

$$\frac{55,56}{55,56 + m}$$