

Biofizika

írásbeli vizsga, 21. napszaktól (vizsga előkészület)

2 óra előadás, 1 óra gyakorlat egyben

vizsga - 200 pont, felkészítő ZH - 100 pont, HF - 30 = 3 x 10 pont

nyitott könyves vizsga

előadást 80%-a, minden órán katalógus

Alapismertek:

→ $A \xrightleftharpoons[k_1]{k_2} B$ $k = \frac{[B]}{[A]}$ $[A], [B]$ egyensúlyi koncentráció

→ Szabványos entalpia / Gibbs free energy: $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[B]}{[A]}$ nem egyensúly

⇒ Egyensúly esetén: $-\Delta G = 0$ ⇒ rendezésel végezhető hasonló munka

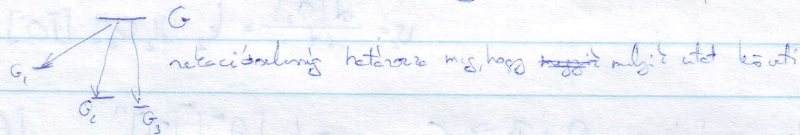
$$\hookrightarrow \Delta G^\circ = -RT \ln \frac{[B]}{[A]}$$

→ Reakció irány: $-\Delta G < 0 \Rightarrow A \rightarrow B$ és $\frac{[B]}{[A]} = Q < k$

$-\Delta G > 0 \Rightarrow B \rightarrow A$ és $\frac{[B]}{[A]} = Q > k$

Példa: Glükóz bomlása: $\Delta G < 0 \Rightarrow$ termodinamika: feltétel

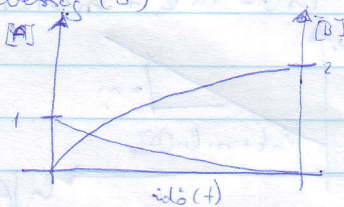
⇒ ettől még nem látás, hogy véglegesség ⇒ kinetika feltétel fontosabb.



→ Reakciósebesség: $A \rightarrow 2B$ sebesség (v)

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

$$v_1 \neq v_2 \text{ és } v_2 = 2v_1$$



$$v_1 = -\frac{1}{3} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{4} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{5} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{6} \frac{d[D]}{dt} \Rightarrow v = \pm \frac{1}{n} \frac{d[n]}{dt}$$

→ Sebesség: egyenlet: $v = k \cdot f(c_1, c_2, c_3, \dots, c_n)$ rendszám

$$v = \frac{d[A]}{dt} = k \cdot [A]^m \rightarrow \text{sebesség: állandó / egyenlet}$$

$$k = k(T, p, c)$$

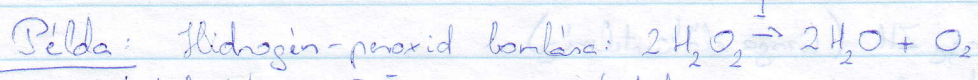
⇒ Ideális állapot: $k = f(T, p)$ } $T =$ hőmérséklet, $c =$ koncentráció \Rightarrow nagy vízben oldat

Reális állapot: $c \gg c$ } $p =$ nyomás

→ Reakciómechanizmus: Egy modell, amely magyarázza a bruttó reakciót elemi reakciók önszekvenciájaként

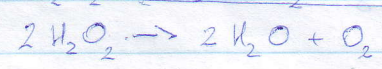
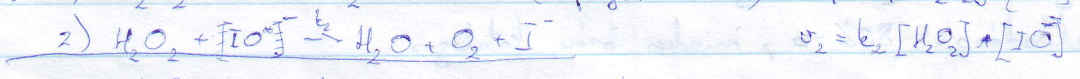
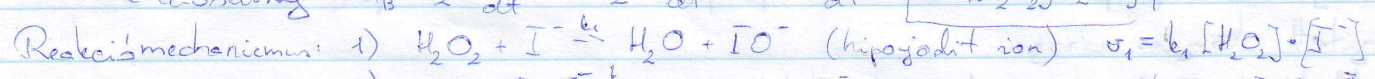
⇒ Elemi reakció: nem bontható tovább egyszerűbb reakcióra

↳ megadja, hogy mi történik a molekulák/atomok szintjén \Rightarrow utasítások



→ katalizátor: I^- ion vagy kataláz enzim

reakciósebesség: $v_{\text{O}_2} = \frac{1}{2} \frac{d[\text{O}_2]}{dt} = \frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = \frac{d[\text{I}^-]}{dt} = k \cdot [\text{H}_2\text{O}_2] \cdot [\text{I}^-]$



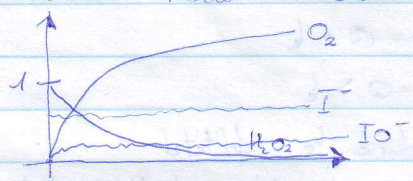
⇒ Selektív meghatározás lépés: 1)

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

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

$\Rightarrow k_1 = 2k$

⇒ Alternatív modell: Stacioner állapot / Steady state



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

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

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

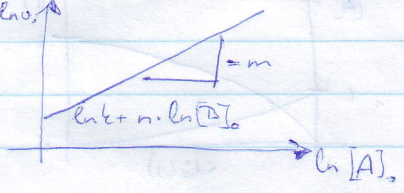
$v_2 = k_2 \cdot [\text{H}_2\text{O}_2] \cdot [\text{IO}^-] = k_2 \cdot [\text{H}_2\text{O}_2] \cdot \frac{k_1}{k_2} \cdot [\text{I}^-] = k_1 \cdot [\text{H}_2\text{O}_2] \cdot [\text{I}^-]$

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

Reakciósebesség mérés: $\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{C}$ $v = k [\text{A}]^m [\text{B}]^n$



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



[A] / mM	[B] / mM	v_0 / mM/s
1	5	0,001
5	5	0,025
10	5	0,1

$v_0 \propto [\text{A}]^2$

Biofizika előadás

Zsuzsanna Péter
IX. 16

Reakciósebesség: koncentrációváltozás $\Rightarrow v = \frac{dc}{dt}$

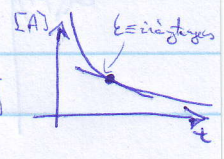
Elemi reakció: az a reakció, amit úgy gondolunk, hogy az atomok szintjén zajlik

Reakciósebességi egyenlet megoldása \Rightarrow integrálással

\Rightarrow Elsőrendű reakció $A \rightarrow B$ (nem kell hozzá utkező) $\Rightarrow \frac{d[A]}{dt} = -k[A]$

DE megoldása: $\frac{d[A]}{dt} = -k[A] \xrightarrow{\text{oldható}} \int_{[A]}^{\frac{d[A]}{[A]}} = -k \int dt \Rightarrow \ln[A] \Big|_{[A]_0}^{[A]} = -kt$

mindkét oldalt integráljuk



$\Rightarrow \ln[A] - \ln[A]_0 = -kt \Rightarrow \ln \frac{[A]}{[A]_0} = -kt \Rightarrow \frac{[A]}{[A]_0} = e^{-kt} \Rightarrow [A] = [A]_0 e^{-kt} \quad | \quad [k] = \text{sec}^{-1}$

reakciósebesség / koncentráció
reakciósebesség / koncentráció

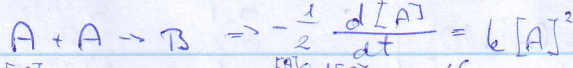
Relaxációs idő: $\tau := \frac{1}{k} \Rightarrow [A] = [A]_0 e^{-t/\tau} \quad [\tau] = \text{sec}$

Elődő: $\tau \Rightarrow$ amikor $t = \tau \cdot n = n_0 e^{-1} \Rightarrow n = \frac{n_0}{2,718}$

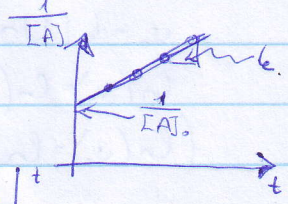
Felzési idő: $\tau_{1/2} = t \Rightarrow n = \frac{n_0}{2} \Rightarrow \frac{1}{2} = e^{-\tau_{1/2}/\tau} \Rightarrow 2 = e^{\tau_{1/2}/\tau} \Rightarrow \ln 2 = \frac{\tau_{1/2}}{\tau} = 0,693$

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

Másodrendű reakció: $A + B \rightarrow C + D$ (két molekula utkező)

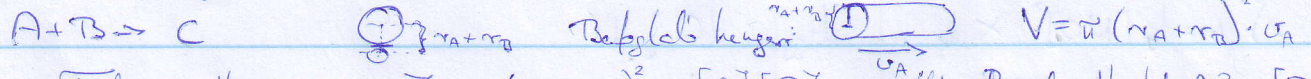


DE megoldás: $-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^2 \Rightarrow -\int_{[A]}^{\frac{d[A]}{[A]^2}} = k \int dt \Rightarrow \frac{1}{[A]} \Big|_{[A]_0}^{[A]} = k \cdot t$



Arrhenius (1889): Miért változik a reakcióállandó különböző körülmények (hőmérséklet) között?

- 1) utkezős kell 2) rámutat az utkezős orientációja 3) kell aktiválási energia is
- \Rightarrow nagyobb hőmérsékleten több az utkezős \Rightarrow valószínűbb a sikeres utkezős



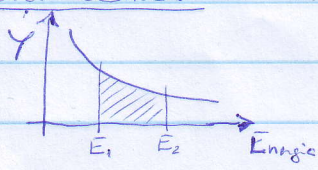
Teljes utkezősre: $Z = \pi (r_A + r_B)^2 v_A [A][B]$ \Rightarrow hány B-vel utkező A? $\propto [B]$

$v_{rel} = \sqrt{\frac{8}{\pi} \frac{k_B T}{\mu}}$ (relatív sebesség)

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

szűrő: $E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} k_B T \Rightarrow v = \sqrt{\frac{3 k_B T}{m}}$

Maxwell-eloszlás:



terület $= \int_{E_1}^{E_2} Y dE = \frac{n(E_2) - n(E_1)}{N}$ $Y = \frac{1}{RT} e^{-E/RT}$ Arrhenius-állandó

$A + B \rightarrow C$ $v = k [A][B]$ Arrhenius szerint állandó

redukált tömeg $\mu = \frac{m_A + m_B}{2}$

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

aktiválási energia E^*

redukált tömeg μ

orientáció (szűrő) k

hőmérséklet T

Definiáljuk $A' + t: A' = A \cdot T^{1/2}$

$A' = \pi (r_A + r_B)^2 \left[\frac{8 k_B T}{\pi \mu} \right]^{1/2} \cdot P$

$\frac{k}{T^{1/2}} = A' \cdot e^{-E^*/RT}$

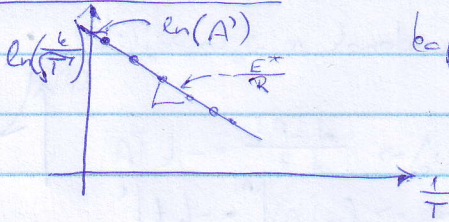
Az az Arrhenius-állandót ezért felírhatjuk

állandóval, mivel T -vel csak gyökös része az állandó értéke

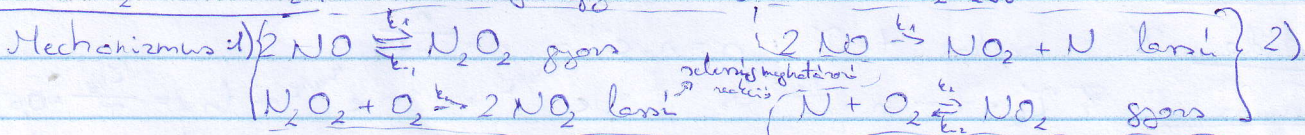
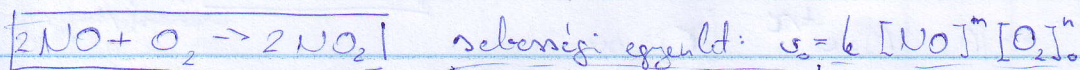
$\Rightarrow e^{-E^*/RT}$ értéket sokkal nagyobb a T -től függően

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

Arrhenius ábrája: aktiválási energia számolható és P valószínűségi faktorból kapunk információt (mind kisebb, annál aránytalanul a molekulák)



Gyakorlat



$v = k [NO]^m [O_2]^n \Rightarrow NO$ mennyisége nagy, ezért koncentrációja állandónak tekinthető

$\ln(v) = \ln(k [NO]^m) + n \ln[O_2]$
 $(\ln(v) = \ln(k [O_2]^n) + m \ln[NO]^m)$

$[O_2]$ μM	v	$\ln[O_2]$	$\ln(v)$
0,1	$6,768 \cdot 10^{-2}$	-3,210	-3,601
0,2	$1,354 \cdot 10^{-1}$	-2,517	-3,508
0,4	$2,707 \cdot 10^{-1}$	-1,824	-4,131
0,8	$5,414 \cdot 10^{-1}$	-1,131	-7,521
1,6	1,083	-6,828	-6,828

$v = k [NO]^2 [O_2]$

inertangens: $\alpha = \frac{n \left(\sum_{i=1}^n x_i y_i \right) - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)}{n \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} = |1 = n|$
 FFH kimérettel $NO - n = |n = 2|$

- $v = k_2 [N_2O_2] [O_2]$ $K = \frac{[N_2O_2]}{[NO]^2}$ $[N_2O_2] = K [NO]^2 \Rightarrow v = k_2 K [NO]^2 [O_2]$ ✓ egyeztetés eredménye
- $v = k_4 [NO]^2 \times$ az nem $f_{ss} = [O_2]^{-1}$

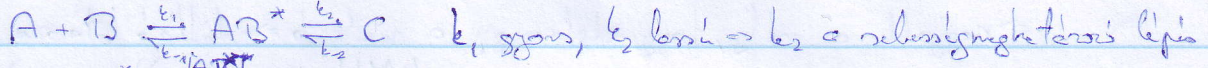
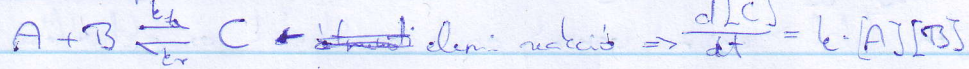
Reakciókinetika }
 Reakciósebesség hőmérsékletfüggése: \rightarrow exponenciális tag

- Van't Hoff (1884): $k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}} \Rightarrow$ első Nobel-díjat ő kapta

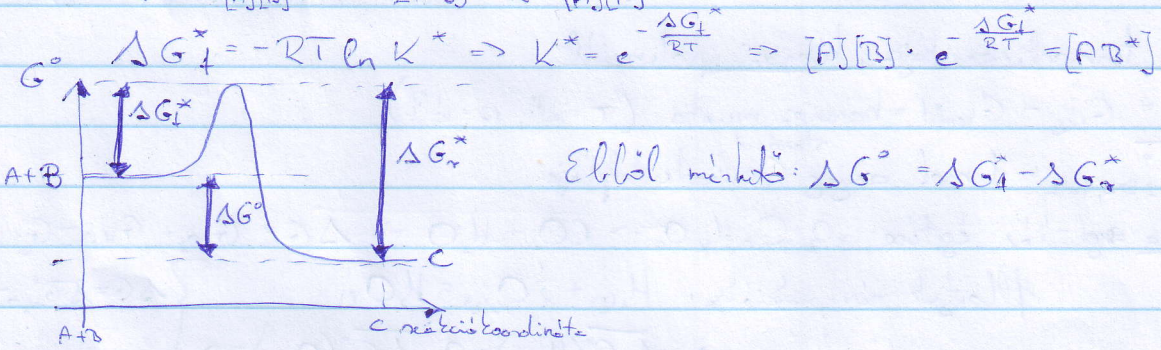
- Arrhenius (1889): kímélet B-t: $k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$

- Egy másik megközelítés: Polanyi/Eyring - átmeneti állapot / aktivált komplex

Átmeneti komplex elmélet: \Rightarrow kapcsolatot a termodinamika és a reakciókinetika közt



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



ΔG_f^\ddagger aktiválási energiát általában a termikus mozgás / mozgás sebje: $k_B \cdot T$
 + mozgási energia: $E = h \cdot \nu$ (ahol $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$ [Boltzmann-10], $h = 6.63 \cdot 10^{-34} \frac{J}{s}$ [Planck-10])

Eyring (és Polanyi) feltételezése: $k_2 = \nu \Rightarrow \frac{d[C]}{dt} = k_2 [AB^*] = \nu [AB^*]$

\Rightarrow termikus energia + mozgási ~~energia~~ egyenletei: $k_B \cdot T = h \cdot \nu \Rightarrow \nu = \frac{k_B \cdot T}{h}$

$\Rightarrow \frac{d[C]}{dt} = \nu [AB^*] = \frac{k_B \cdot T}{h} [AB^*] = \frac{k_B \cdot T}{h} e^{-\frac{\Delta G^\ddagger}{RT}} [A][B] = k [A][B]$, ahol $k = \frac{k_B \cdot T}{h} \cdot e^{-\frac{\Delta G^\ddagger}{RT}}$

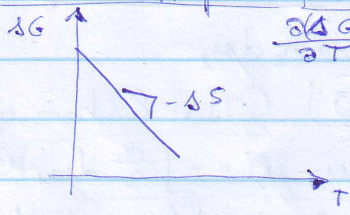
k_f ~~elemi~~ reakció sebességi állandója

Tudjuk még: $\Delta G = \Delta H - T \Delta S \Rightarrow k = \left(\frac{k_B \cdot T}{h}\right) \left(e^{-\frac{\Delta H^\ddagger}{RT}}\right) \left(e^{\frac{\Delta S^\ddagger}{R}}\right)$

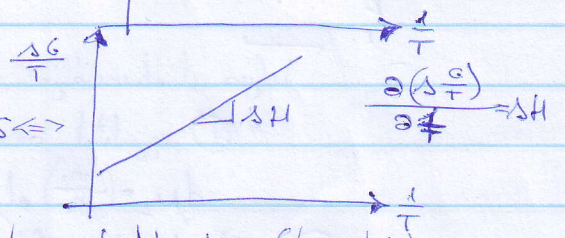
$\Rightarrow \ln(k) = \ln\left(\frac{k_B \cdot T}{h}\right) - \frac{\Delta H^\ddagger}{RT} + \frac{\Delta S^\ddagger}{R} = \ln(k_B) + \ln(T) - \ln(h) - \frac{\Delta H^\ddagger}{RT} + \frac{\Delta S^\ddagger}{R}$

$\Rightarrow \ln(k) - \ln(T) = -\frac{\Delta H^\ddagger}{RT} + \ln k_B - \ln(h) + \frac{\Delta S^\ddagger}{R}$

Van't Hoff plot: $|\Delta G = \Delta H - T \Delta S|$



$\Leftrightarrow \frac{\Delta G}{T} = \frac{\Delta H}{T} - \Delta S = \Delta H \cdot \frac{1}{T} - \Delta S \Leftrightarrow$



Cél: ΔH , ΔS paraméterek meghatározása (kímélet),
 illetve ezen túl k_f reakciósebességi állandó hőmérséklet-függése

2)

Gyakorlat

Először a reakció, $t = 3 \text{ min}$, $k = ?$, $\tau = ?$, $t_{1/2} = ?$, $c_0 = 5 \cdot c_1$

$$[A] = [A_0] \cdot e^{-kt} \Rightarrow [A] = \frac{[A_0]}{5} \Rightarrow \frac{[A_0]}{5} = [A_0] \cdot e^{-k \cdot 180s} \Rightarrow \frac{1}{5} = e^{-k \cdot 180s}$$

$$\Rightarrow \ln \frac{1}{5} = -k \cdot 180s = \ln 5 \Rightarrow k = \frac{\ln 5}{180s} = 8,54 \cdot 10^{-3} \frac{1}{s}$$

$$\tau = \frac{1}{k} = 112s$$

felváltó idő ($t_{1/2}$): ugyanannyi, csak $[A] = \frac{[A_0]}{2} \Rightarrow \tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = 77,5s$

3.) $E^* = 3476 \text{ J/mol}$ $T_0 = 20^\circ\text{C} = 293\text{K}$ $k_0 \cdot 1000 = k_1$, A független T-től

$$k_0 = A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT_0}}, k_1 = A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT_1}}$$

$$\frac{k_1}{k_0} = \frac{A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT_1}}}{A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT_0}}} \Rightarrow 1000 = e^{-\frac{E^*}{RT_1} + \frac{E^*}{RT_0}}$$

$$\ln(1000) = -\frac{E^*}{RT_1} + \frac{E^*}{RT_0} = E^* \cdot \frac{1}{R} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{-R \cdot \ln(1000)}{E^*} + \frac{1}{T_0} = \frac{1}{T_1} \Rightarrow T_1 = \frac{1}{\frac{1}{T_0} - \frac{R \cdot \ln(1000)}{E^*}} = 308\text{K} \Rightarrow \Delta T = 15\text{K}$$

1) $A \rightleftharpoons B$ ($\Delta G^\circ = -40 \text{ kJ/mol} \Rightarrow$ a) $K = ?$ ($T = 25^\circ\text{C}$), b) $\frac{[B]}{[A]} = 5$, $\Delta G = ?$, reakció irány?

a) $T = 25^\circ\text{C} = 298\text{K}$, $\Delta G^\circ = -RT \ln K \Rightarrow e^{-\frac{\Delta G^\circ}{RT}} = K$ $R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$

$$K = 1,027 \cdot 10^7$$

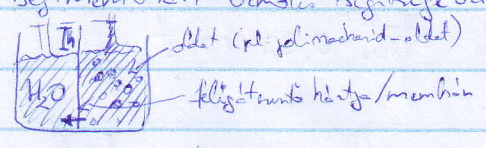
b) $K_2 = \frac{[B]}{[A]} = 5 \Rightarrow \ln K_2 = \ln 5 \Rightarrow \Delta G = -RT \ln K_2$

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln K_2 = -360125 \text{ J/mol}$$

Előadás

Ozmózis: a sejtmembrán ^{felület} ozmózis segítségével kapcsolódik a környezethez

Osmometri:



Π : ozmotikus nyomás $\left[\frac{\text{din}}{\text{cm}^2} \right]$

$\Pi = h \cdot \rho \cdot g$

Potenciál: ~~csak~~ erőterhez tartozó potenciál (tárgy) \Rightarrow deriváltja az erő

\hookrightarrow kémiai potenciál: koncentrációs különbség

\hookrightarrow Gibbs-féle szabadenergia extenzív mennyiség \Rightarrow intenzív mennyiséggel nemritkán ~~definiál~~

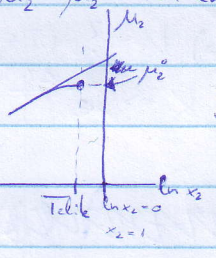
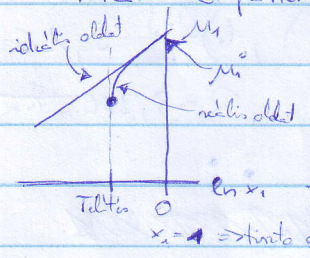
Kémiai potenciál definíciója: $\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, p, n_j}$

\rightarrow Additivitási szabály: $G = \mu_1 n_1 + \mu_2 n_2$

\rightarrow Gibbs-Douhem egyenlet: $n_1 d\mu_1 + n_2 d\mu_2 = 0$

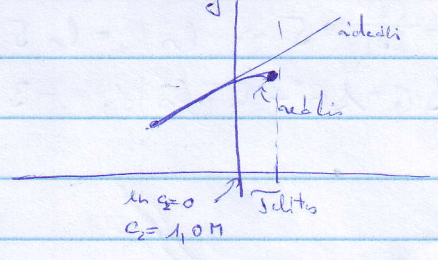
\rightarrow Raoult-törvény (híg oldatok törvénye): $\mu_1 = \mu_1^0 + RT \ln x_1$
 típus oldat kémiai potenciálja, melyet oldat egészére alkalmazhatunk

másként komponense: $\mu_2 = \mu_2^0 + RT \ln x_2$, ahol μ_2^0 nem a típus oldat egy potenciálja, hanem ^{más} konstans, az integrációs konstans

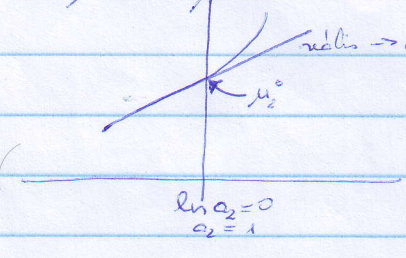


Nem mutatjuk a mol törtet, helyette inkább a ~~koncentrációt~~ koncentrációt használjuk.

$$x_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \Rightarrow \frac{n_1/c}{n_1/c + n_2/c} = \frac{c_1}{c_1 + c_2}$$



$\Rightarrow \mu_{reális} = \mu_{ideális} + RT \ln a$, ahol a az ~~aktív~~ aktivitás



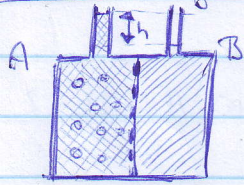
Probléma: $\mu = f(c) \rightarrow$ a kémiai potenciál még mindig a koncentráció függvénye $\Rightarrow a_2 = \gamma_2 \cdot c_2$, ahol $\lim_{c_2 \rightarrow 0} \gamma_2 = 1$

\uparrow aktivitási koefficiens
 \hookrightarrow minél inkább eltér az 1-től, annál távolabb vagyunk az ideálitól

Alapvető: Zárt, heterogén rendszerben, ha az anyag szabadon keveredhet a fázisok közt, akkor a különböző ~~stádium~~ fázisokban egyenlő a kémiai potenciál

Kolligatív tulajdonság: részecskék számától függ, a mérettől nem
 \Rightarrow pl. ozmotikus nyomás

Ozmotikus nyomás jelentősége mestertechnikában: darabnam meghatározás



$$\mu_{1A} = \mu_{1B} \quad \pi [\text{din/cm}^2] = h [\text{cm}] \cdot \rho [\text{g/cm}^3] \cdot g [\text{cm/s}^2]$$

$$(1 \text{ atm} = 1,01 \cdot 10^6 \text{ din/cm}^2)$$

$$\mu_{1A}(P+\bar{u}, x_{1A}) = \mu_{1A}^{\circ}(P+\bar{u}) + RT \ln(\sigma_{1A} x_{1A})$$

$$\mu_{1B}(P, x_{1B}) = \mu_{1B}^{\circ}(P) + RT \ln(\sigma_{1B} x_{1B}) \quad \text{mivel } \sigma_{1B} = 1 \text{ és } x_{1B} = 1$$

$$\Rightarrow \mu_{1A}^{\circ}(P+\bar{u}) - \mu_{1B}^{\circ}(P) = -RT \ln(\sigma_{1A}) - RT \ln(x_{1A})$$

Ho igaz-e az $\mu = \mu^{\circ} + RT \ln p$?

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

Percális fajlagos térfogat: térfogattöbbség, ha 1 mol anyag adunk meg \bar{V} anyaghoz

↳ Jelle: \bar{V}

$$\frac{\partial \mu_i}{\partial p} = \bar{V}_i^{\circ} \Rightarrow d\mu_i = \bar{V}_i^{\circ} \cdot dp \Rightarrow \int_p^{p+\bar{u}} d\mu_i = \int_p^{p+\bar{u}} \bar{V}_i^{\circ} dp \Rightarrow \mu_i^{\circ}(p+\bar{u}) = \mu_i^{\circ}(p) = \bar{V}_i^{\circ}(p+\bar{u}) - \bar{V}_i^{\circ}(p)$$

$$\Rightarrow \bar{V}_i^{\circ} \bar{u} = -RT \ln x_{1A} - RT \ln \sigma_{1A}$$

$$\bar{V}_i^{\circ} \pi = -RT (\ln 1 - x_2) - RT \ln \sigma_1 \Rightarrow -RT \{x_2^* - RT \ln \sigma_1\}$$

$$\Rightarrow \pi = \frac{RT n_2}{n_1 \bar{V}_1^{\circ}} - \frac{RT \ln \sigma_1}{\bar{V}_1^{\circ}} \quad n_1 \bar{V}_1^{\circ} = V_1 \approx V \quad \rho = \frac{w_2}{M_2}$$

* Tegyük: $x_1 + x_2 = 1 \Rightarrow x_1 = 1 - x_2 \Rightarrow \pi = \frac{RT n_2}{V} - \frac{RT \ln \sigma_1}{\bar{V}_1^{\circ}} = RT c_2 - \frac{RT \ln \sigma_1}{\bar{V}_1^{\circ}}$

$$x_2 \approx 10^{-5} \ll x_1 \Rightarrow \ln(1 - \delta) \approx -\delta \text{ és } \ln(1 + \delta) \approx \delta, \text{ ha } \delta \ll 1$$

$$x_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} \Rightarrow \text{mivel } n_2 \ll n_1 \Rightarrow x_2 \approx \frac{n_2}{n_1}$$

$$\Rightarrow \pi = \frac{RT w_2}{M_2} - \frac{RT \ln \sigma_1}{\bar{V}_1^{\circ}} \quad \text{ozmotikus nyomás meghatározása}$$

vagy molális tömegarány!

Példa: $M = 25000$, $w_2 = 10 \text{ g/l}$, $T = 298 \text{ K}$, $h = 10 \text{ cm}$, $\pi = 0,01 \text{ atm}$, $R = 0,08206 \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$

Gyököslet

1.) $w_1 = 10 \text{ g/l} \rightarrow M_1 = 64 \text{ kDa}$, $w_2 = 10 \text{ g/l} \rightarrow M_2 = 16 \text{ kDa}$, $w_3 = 10 \text{ g/l} \rightarrow M_3 = ?$

$T = 25^\circ\text{C} = 298 \text{ K}$ $\pi = 0,04358 \text{ atm}$

$$\pi = RT \sum_{i=1}^n c_i = \dots$$

2) $A \rightarrow B$ $v = k[A]^r$ $\xrightarrow{\text{lineárisítgás}} \ln v = \ln k + r \ln[A] \Rightarrow \ln v \sim \ln[A]$

$\ln[A]$	$\ln v$	$\frac{mH}{s}$	$\ln v$	$\ln[A]$	$[A]$	v
0,85	2,53	0,53	1,61	5	1,7	
4,30	5,3	2,13	2,30	10	8,4	
8,24	7,33	3,04	2,71	15	21,0	
14,00	15,26	5,70	6,62			

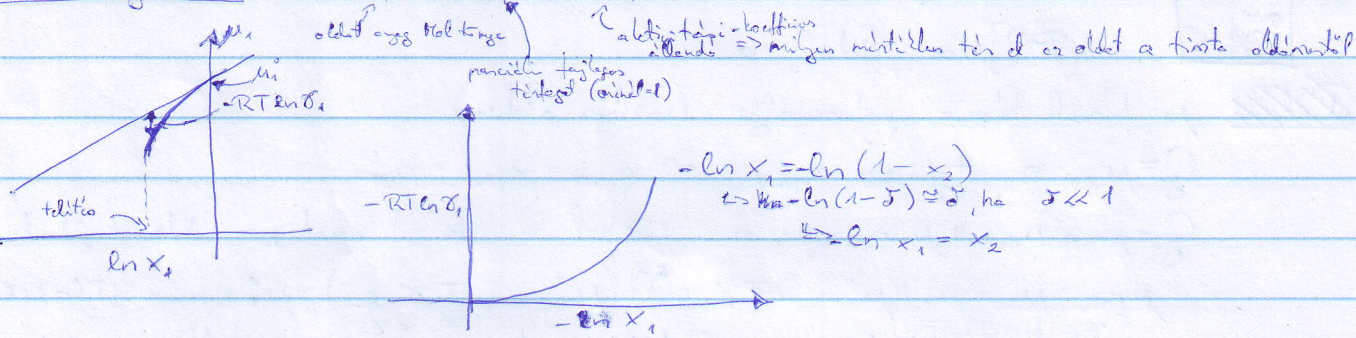
$$n=3 \rightarrow r = \frac{n \sum \ln[A] \ln v - \sum \ln[A] \cdot \sum \ln v}{n \cdot \sum (\ln[A])^2 - (\sum \ln[A])^2} = 2,3$$

$$\ln k = \frac{\sum \ln v \sum (\ln[A])^2 - \sum \ln[A] \cdot \ln v \sum \ln[A]}{n \cdot \sum (\ln[A])^2 - (\sum \ln[A])^2} = -3,15 \Rightarrow k = 0,04 \text{ min}^{-2,3} \cdot \text{s}$$

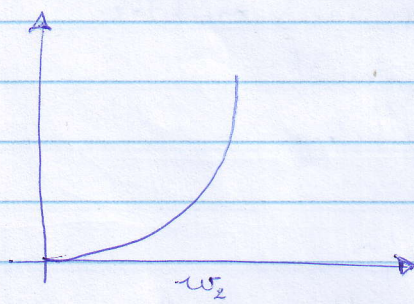
Előadás

Ozmózis nyomás: $\pi = \frac{RT}{M_2} - \frac{RT}{V_1^0} \ln \sigma_1$

Nonidealitás



$-\ln x_1 = -\ln(1-x_2)$
 $\hookrightarrow \ln(1-x_2) \approx -x_2$, ha $x_2 \ll 1$
 $\hookrightarrow -\ln x_1 = x_2$



$-\ln x_1 \approx 55,51 M_2$
 $x_2 \Rightarrow \omega_2$
 $x_2 = \frac{n_2}{n_1+n_2} \approx \frac{n_2}{n_1} = \frac{c_2}{c_1} = \frac{c_2}{55,51} = \frac{\omega_2}{M_2} \cdot \frac{1}{55,51}$

Újra - kértajentia

Taylor-sor: $-\frac{1}{V_1^0} \ln \sigma_1 = B_0 + B_1 \omega_2 + B_2 \omega_2^2 + \dots$

a) Mi B_0 értéke? $\omega_2 = 0 \Rightarrow -\frac{1}{V_1^0} \ln \sigma_1 = B_0 \Rightarrow B_0 = 0$

b) Mi B_1 értéke? $B_1 = 0$ (kerülti megelégedés) $\Rightarrow \frac{\partial(-\frac{1}{V_1^0} \ln \sigma)}{\partial \omega_2} = B_1$

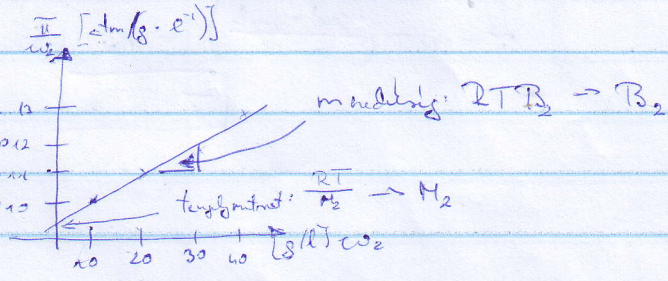
c) Gorké értéke: $-\frac{1}{V_1^0} \ln \sigma_1 = B_2 \omega_2^2 + B_3 \omega_2^3 + \dots$

$\Rightarrow \pi = RT \frac{\omega_2}{M_2} + RT (B_2 \omega_2^2 + B_3 \omega_2^3 + \dots) \Rightarrow \boxed{\frac{\pi}{\omega_2} = RT \left(\frac{1}{M_2} + B_2 \omega_2 \right)}$

2. virial előadás (B2)

Ozmózisban 3 mérési lépés:

ω_2 (g/l)	π (atm)	ω_2	$\frac{\pi}{\omega_2}$
10	0,011	0,0011	0,0012
20	0,024	0,0022	0,0011
30	0,039	0,0033	0,0012

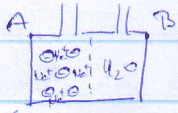


$B_2 > 0 \Rightarrow$ további kölcsönhatás a molekulák közt, $B_2 < 0 \Rightarrow$ csorvás...
 \Rightarrow pl. félrejel azonos molekulák között, töltéselvonás miatt is \Rightarrow további egyensúly
 \Rightarrow izodifúziós ponton belül kölcsönhatás (pl. pH) közt

Ozmózis - nyomás additivitása: $\pi = RT \sum c_i$; $\pi = RT \sum c_i$

Elektrolitok:

→ A félvezető felületénél megfigyelhető kationok és anionok



$$\pi = RT \ln 2a$$

$$[P^{\ominus}] = a, [Na^+] = a$$

~~ΔG~~ μ : NaCl kémiai potenciálja (vízben oldva)

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

$$G = \mu_{H_2O} \cdot n_{H_2O} + \mu_+ \cdot n_+ + \mu_- \cdot n_- : \text{ahol } + : Na^+ \text{-t jelenti, } - : Cl^- \text{-t jelenti}$$

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

$\left\{ \begin{matrix} \gamma_+ \\ \gamma_- \end{matrix} \right\}$ külön nem mérhető, csak $\left\{ \gamma_+ \cdot \gamma_- \right\}$ mérhető

$$\mu_{\pm}^{\circ} = \frac{\mu_+^{\circ} + \mu_-^{\circ}}{2} : \text{átlagos standard ion kémiai potenciál}$$

$$\gamma_{\pm}^{\circ} = \gamma_+ \cdot \gamma_- : \text{átlagos ion aktivitási koefficiens}$$

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

Adjunk NaCl-ot a vízbe tartalmazó B tartályba! ⇒

	Kérdeti állapot		Egyensúlyi állapot + [NaCl] = b után		
	A	B	A	B	
[P ⁻]	a	0	a	0	$Na^+ + Cl^- \xrightarrow{K_D} NaCl$ $K_D = \frac{[Na^+]_A [Cl^-]_A}{[NaCl]_A} = \frac{[Na^+]_B [Cl^-]_B}{[NaCl]_B}$ $[NaCl]_A = [NaCl]_B$
[Na ⁺]	a	b	a+x	b-x	
[Cl ⁻]	0	b	x	b-x	

$(a+x)x = (b-x)^2 \Leftrightarrow [Na^+]_A [Cl^-]_A = [Na^+]_B [Cl^-]_B$
 $\Rightarrow x = \frac{b^2}{a+2b}$

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

$$\pi = RT \left(\frac{2a^2 + 2ab}{a+2b} \right) \Rightarrow \text{ha } b \gg a \Rightarrow RT \left(\frac{2a^2 + 2ab}{a+2b} \right) \approx RT \left(\frac{2ab}{2b} \right) = RTa$$

$$\boxed{\bar{\mu} = RTa}$$

Oldotték termodinamikája:

$\left\{ \begin{array}{l} \text{Donnan-potenciál: } \Delta \Phi_D \\ \text{1 fülleben: } [V] = \frac{[F]}{[C]} \\ \bar{F} = \text{Faraday} = \text{konverziós faktor} \quad (\text{Coulomb-óránéme 1 mol protonban}) \\ \bar{F} = N_A \cdot e = 96,487 \frac{C}{mol} \end{array} \right.$

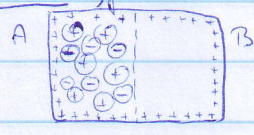
Élektromos töltés terben:

$W = z \cdot N_a \cdot e \cdot \Phi = z \cdot \bar{F} \cdot \Phi$
 $e = 1,602 \cdot 10^{-19} C$

Donnan potenciál: $\Phi_D = \Phi_B - \Phi_A$ (munka) kémiai potenciál elektromos potenciál

Elektrokémiai potenciál: $\bar{\mu}_+ = \left(\frac{\partial G}{\partial n_+} \right)_{T, p, n_-} = \left(\mu_+^0 + RT \ln(\gamma_+ \cdot c_+) + z \cdot \bar{F} \cdot \Phi \right)$

Kiszámít a potenciálműtést egyik kompartmentjében van Na^+ oldat, a másikon tinta víz



$(\bar{\mu}_+)_{A} = (\bar{\mu}_+)_{B} = \bar{\mu}_B^0(p) + RT \ln(\gamma_+ \cdot c_+) + z \cdot \bar{F} \cdot \Phi_B = \left. \begin{array}{l} = \bar{\mu}_A^0(p) + RT \ln(\gamma_+ \cdot c_+) + z \cdot \bar{F} \cdot \Phi_A \\ 0 = -\pi \cdot V_+ + RT \ln \frac{(\gamma_+ \cdot c_+)_{B}}{(\gamma_+ \cdot c_+)_{A}} + z \cdot \bar{F} \cdot (\Phi_B - \Phi_A) \end{array} \right\}$

$\Rightarrow \Delta \Phi_D = \Phi_B - \Phi_A = -\frac{RT}{z \cdot \bar{F}} \ln \left[\frac{(\gamma_+ \cdot c_+)_{B}}{(\gamma_+ \cdot c_+)_{A}} \right] \Rightarrow \Phi_D = -\frac{RT}{z \cdot \bar{F}} \ln \left[\frac{c_{+B}}{c_{+A}} \right]$

b) $NaCl$ -t adunk a rendszerbe

Ha $a[NaCl] = [b] > [a] = [Cl^-]$

	A	B
$[pO_2]$	a	0
$[Na^+]$	a+x	b-x
$[Cl^-]$	x	b-x

$x = \frac{b^2}{a+2b}$
 $+ S_0 \Rightarrow \Delta \Phi_D = 0$

$\Delta \Phi = -\frac{RT}{z \cdot \bar{F}} \ln \left(\frac{b-x}{a+x} \right)$

ha $b \gg a$ $\Delta \Phi = -\frac{RT}{z \cdot \bar{F}} \ln \left(\frac{b}{a+b} \right) = 0$

Debye-Hückel de:

Coulomb: $\bar{F} = \frac{z_1 \cdot z_2}{D \cdot r}$: z_1, z_2 : kationok elektricitás egyenlő, r : távolság, F : erő, D : dielektromos állandó

Elektromos térerő: $E = -\frac{\bar{F}}{z_2} = -\frac{z_1 \cdot z_2}{D \cdot r^2 \cdot z_2} = -\frac{z_1}{D \cdot r^2}$

Potenciál az a függvény, melynek fél részét deriváltja a térerő

$\Rightarrow -\frac{\partial \Phi}{\partial r} = E = \frac{\bar{F}}{z_2}$

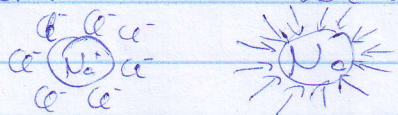
Tonaósnység: $I = \frac{1}{2} \sum_i c_i \cdot z_i^2$

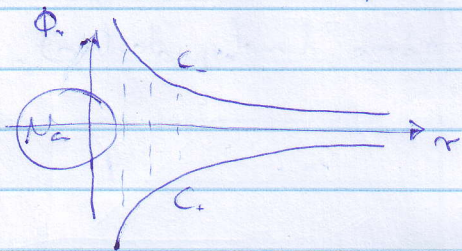
$\bar{\mu}_{NaCl} = 2 \mu_i^0 + RT \ln(\gamma_+^2 \cdot c_+ \cdot c_-) = 2 \mu_i^0 + RT \ln \gamma_+^2 + RT \ln c_+ \cdot c_-$

$\log_{10} \gamma_+ = -0,51 \cdot |z_+ \cdot z_-| \cdot I^{1/2}$

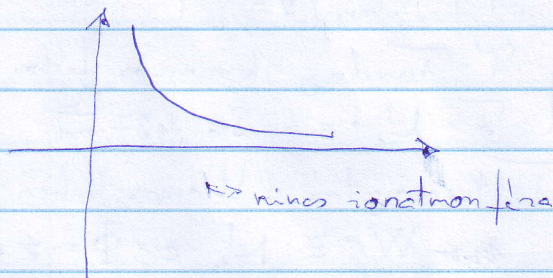
Feltételezések az ion környezetére:

1) Coulomb ~~sz~~ ^{ter}terméketű erők dominálnak

2)  Ionatmoszféra és gömbimmetria

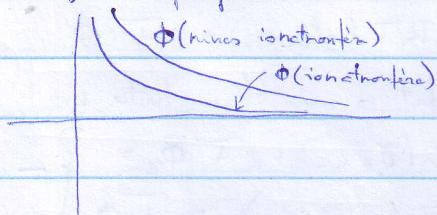


$$\Phi_r = \frac{z}{D \cdot r}$$



3) Elektronos tér gömbimmetrius

4) Szuperpozíció a töltésekre: feltételezések helyettesíthető kömmunkáló 1 pontba



$$\Phi_{n,p} = \frac{z \cdot e}{D \cdot r} = \frac{z}{D \cdot r} \cdot e \cdot r$$

$$\text{ahol } D = \frac{8 \pi N_A e^2}{1000 \cdot D \cdot \epsilon_0 \cdot T} \cdot I$$

Gyakorlat

1) $A \rightleftharpoons B$

működés, de ha nagyon kicsi, ekkor más koncentráció is

$$\mu_A = \mu_A^0 + RT \ln(c_A) \quad , \quad \mu_B = \mu_B^0 + RT \ln(c_B) \quad \left. \begin{array}{l} \mu_A + RT \ln(c_A) = \mu_B + RT \ln(c_B) \\ (\mu_B^0 - \mu_A^0) + RT \ln \frac{c_B}{c_A} = 0 \end{array} \right\}$$

Egyensúly esetén: $\mu_A = \mu_B$

$$K = \frac{[B]}{[A]} = \frac{c_B}{c_A} \rightarrow$$

$$\mu_A^0 - \mu_B^0 = -17800 \text{ J/mol}, T = 37^\circ\text{C} = 310\text{K}$$

$$\ln \frac{c_B}{c_A} = \frac{\mu_A^0 - \mu_B^0}{RT} = \ln K$$

$$\ln \frac{c_B}{c_A} = \frac{-17800}{8,314 \cdot 310} = \ln K$$

$$K = e^{-6,314} = 10^{-3}$$

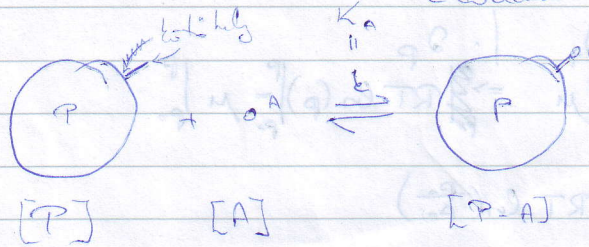
2) $M = 45 \text{ kDa}$ $c = 10 \text{ g/mol}$ $T = 22^\circ\text{C} = 295\text{K}$ $\pi = 2,152 \cdot 10^3 \text{ atm}$

$$\pi_i = RT c_i = 5,383 \cdot 10^3 \text{ atm}, c_i = a = \frac{10 \text{ g/mol}}{45000 \text{ g/mol}} = 2,22 \cdot 10^{-4} \text{ M}$$

$$\frac{\pi}{RT} = 4 \quad \pi = RT \cdot \left(\sum_i c_i - \sum_j c_j \right) = RT \left(\frac{n(n+1)z^2 + 2cb}{n^2 + 2c} \right) = 5,604 \cdot 10^3 \text{ atm} \approx RTa$$

$$b = 0,2 \text{ M}$$

Előadás



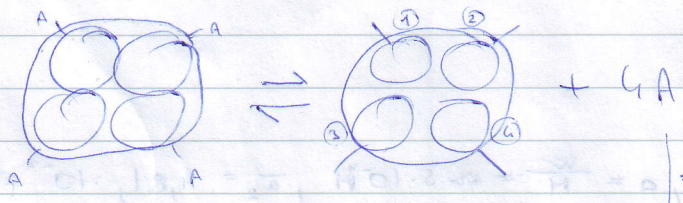
$$k = \frac{[P \cdot A]}{[P][A]}$$

$$k[A] = \frac{[P \cdot A]}{[P]}$$

Definíció:
$$\bar{D} = \frac{\text{költelt A moljainak száma}}{\text{a P moljainak száma}} = \frac{[P \cdot A]}{[P \cdot A] + [P]} = \frac{[P \cdot A]}{[P]}$$

$$\bar{D} = \frac{k[A]}{k[A] + 1} = \frac{k[A]}{k[A] + 1} = \bar{D}$$

Mi történik, ha több köztétele van?



$$\bar{D} = \frac{[0 \cdot \text{hez költött EA}]}{[\text{összes P}]} + \frac{[2 \cdot \text{hez költött EA}]}{[\text{összes P}]} + \dots + \frac{[n \cdot \text{hez költött EA}]}{[\text{összes P}]}$$

$$= \frac{k[A]}{1+k[A]} + \frac{k[A]}{1+k[A]} + \dots + \frac{k[A]}{1+k[A]} = \frac{n \cdot k[A]}{1+k[A]}$$

$$\Rightarrow \bar{D} = \frac{n \cdot k[A]}{1+k[A]}$$

Egyszerű dialízis



A teljes térfogat: $V = w_{H_2O} \bar{V}_{H_2O} + w_P \bar{V}_P + w_A \bar{V}_A$

 $\bar{V}_{H_2O} = 1 \text{ g cm}^{-3} / \rho \quad \bar{V} = 0,725 \text{ cm}^3/\text{g}$

Térfogat fel: $[A]_{\text{kid}} = [A]_{\text{bet}}$ (zárta rendszerben ez elég csak nem is mérjük)

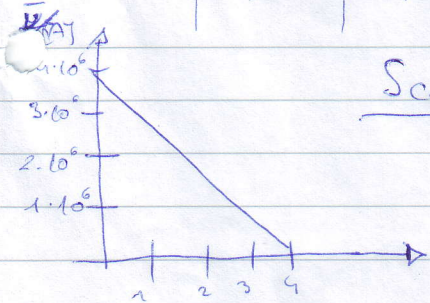
Radioaktív jelölés

$[A]$ (M)	\bar{D}	$\frac{\bar{D}}{[A]}$ (M ⁻¹)
10^{-7}	0,364	$3,64 \cdot 10^6$
10^{-6}	2,000	$2,00 \cdot 10^6$
10^{-5}	3,64	$0,36 \cdot 10^6$

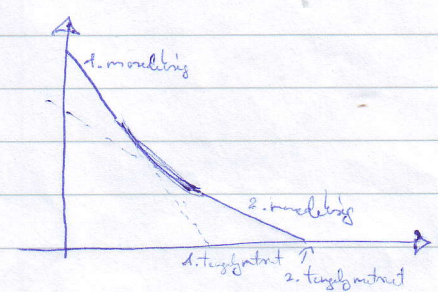
$$SA = \frac{cpm}{A \cdot \text{mólingák}} = \frac{n \cdot k[A]}{1+k[A]} \Rightarrow \bar{D}(1+k[A]) = n \cdot k[A]$$

$$\bar{D} + \bar{D} \cdot k[A] = n \cdot k[A]$$

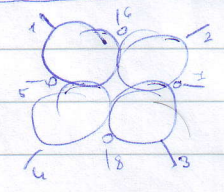
$$\bar{D} = n \cdot k[A]$$



Scatchard - ábrázolás



Nem azonos köztételek:



$$\bar{D} = \bar{D}_1 + \bar{D}_2 + \bar{D}_3 + \bar{D}_4$$

 1. osztály: 1, 2, 3, 4 $\Rightarrow k_1, n_1 = 4$

 2. osztály: 5, 6, 7, 8 $\Rightarrow k_2, n_2 = 4$

1. körzeti egyenlet: $\frac{-n_1 k_1^2 + n_2 k_2^2}{n_1 k_1 + n_2 k_2} \approx k_1$

 2. körzeti egyenlet: $\frac{(n_1 + n_2) k_1 k_2}{n_1 k_1 + n_2 k_2} \approx \frac{(n_1 + n_2) k_2}{n_1}$

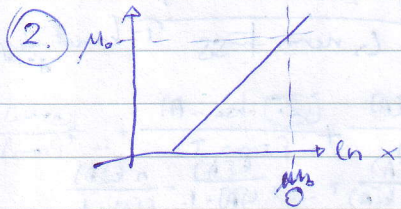
 1. tengelymetsz: $\frac{(n_1 k_1 + n_2 k_2)^2}{n_1 k_1^2 + n_2 k_2^2} \approx n_1$

 2. tengelymetsz: $n_1 + n_2$

Gyököslet - HF megoldás

① $\frac{\partial \mu}{\partial p} = \bar{V}$, $pV = nRT \Rightarrow \mu = \mu^\circ + RT \ln\left(\frac{p}{p_0}\right)$
 $V = n \cdot \bar{V}$, $V = \frac{nRT}{p} \Rightarrow \bar{V} = \frac{RT}{p} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_T$ | $\cdot \partial p$
 $RT \int_{p_0}^p \frac{1}{p} dp = \int_{p_0}^p 1 d\mu \Rightarrow \left. RT \ln(p) \right|_{p_0}^p = \mu \Big|_{p_0}^p$

$\mu(p) - \mu(p_0) = RT \ln(p) - RT \ln(p_0) = RT \ln\left(\frac{p}{p_0}\right)$
 $\mu = \mu^\circ + RT \ln\left(\frac{p}{p_0}\right)$



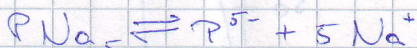
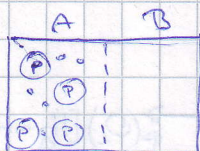
Ideális eset: $\mu = \mu^\circ + RT \ln x_{i2}$ $n_{i2} = \frac{10008}{18 \text{ g/mol}}$
 Reális eset: $\mu = \mu^\circ + RT \ln \frac{p}{p_0}$

③ $\bar{\pi}_1 = RTa$, $\bar{\pi}_2 = RT(n+1)a$, $a = \frac{v}{M} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$, $\bar{u}_2 = 4,81 \cdot 10^{-2} \text{ atm}$

$b_1 = 0,002 \text{ m}^3$
 $\bar{\pi}_3 = RT \left(\frac{n(n+1)a^2 + 2ab}{na + 2b} \right)$

\hookrightarrow Ha $a \ll b \Rightarrow \bar{\pi}_3 = RT \frac{n(n+1)a^2 + 2ab}{na + 2b} = RTa \dots$ $\bar{u} = RT(a + na + 2x - 2b - x)$

Jölvényszegénység



	A	B
[P]	a	b
[Na ⁺]	5a+x	b-x
[Cl ⁻]	x	b-x

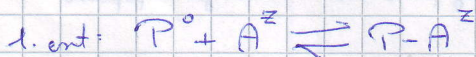
$$[Na^+][Cl^-]_A = [Na^+][Cl^-]_B \Rightarrow (a+x) \cdot x = (b-x)(b-x)$$

$$\Rightarrow x = \frac{5b^2}{5a+2b}$$

$$\Delta \phi = 1,25 mV = \frac{RT}{z \cdot F} \ln \frac{C_{A^+}}{C_{B^+}} = \frac{RT}{z \cdot F} \ln \left(\frac{5a+x}{b-x} \right) \Rightarrow \frac{RT}{z \cdot F} \ln \frac{[A^{++}]_A}{[A^{++}]_B}$$

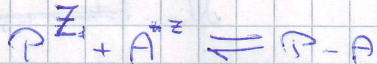
$$\frac{[A^{++}]_A}{[A^{++}]_B} = 1,1$$

Debye-Hückel effektus



$$\Delta G_{int}^0 = -RT \ln k_{int}$$

2. eset: fehérvíz is töltött



$$\Delta G_{obs}^0 = -RT \ln k_{obs}$$

$$\Delta G_{obs}^0 - \Delta G_{int}^0 = \phi(a) \cdot z \cdot e^- \cdot N_A$$

$$RT \ln \frac{k_{obs}}{k_{int}} = -\phi(a) \cdot z \cdot e^- \cdot N_A$$

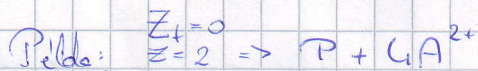
$$k_{obs} = k_{int} \cdot e^{-\frac{z \cdot e^- \cdot \phi(a)}{RT}} = k_{int} \cdot e^{-2wZ_+ \cdot z}$$

$$\phi(a) = \frac{Z_+ e}{D \cdot a} \cdot \frac{1}{\epsilon}$$

$$K^2 = \frac{8 \pi N_A e^2 I}{1000 \cdot D \cdot \epsilon \cdot T}$$

$$w = \frac{N_A e^2}{2 D a} \frac{e}{RT}$$

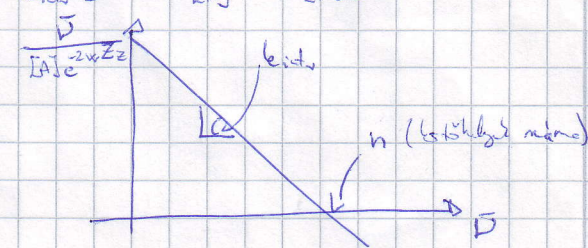
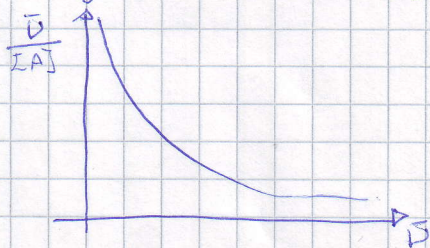
$$\bar{v} = \frac{n(\text{töltött A részecskék})}{n(P)}$$



alkalmazható mértékegységek: \bar{v} abszolút Z k_{obs}

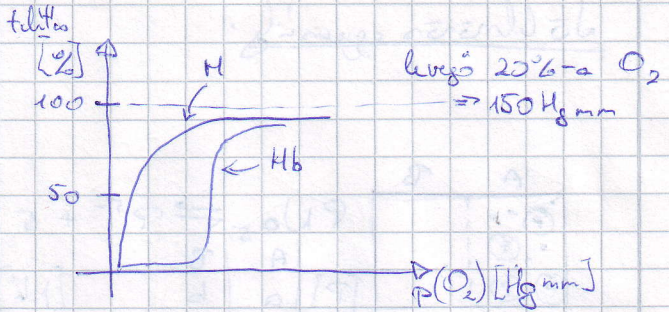
1.	A részecskék töltése	0	1,000
2.	" " "	+2	0,45
3.	" " "	+4	0,20
4.	" " "	+6	0,09

Megoldás: $\bar{v} = \frac{n \cdot k_{int} \cdot e^{-2wZ_+Z}}{1 + k_{int} \cdot e^{-2wZ_+Z} [A]} \Rightarrow \frac{\bar{v}}{[A]e^{-2wZ_+Z}} = n k_{int} - k_{int} \bar{v}$



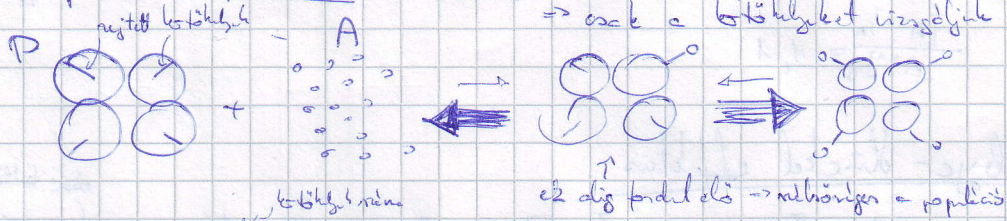
Kooperativitás

Hb (hemoglobin)	M (mioglobin)
4 alegység	1 polipeptid
4 hem csoport	1 hem csoport
4 O ₂ + kst	1 O ₂ + kst



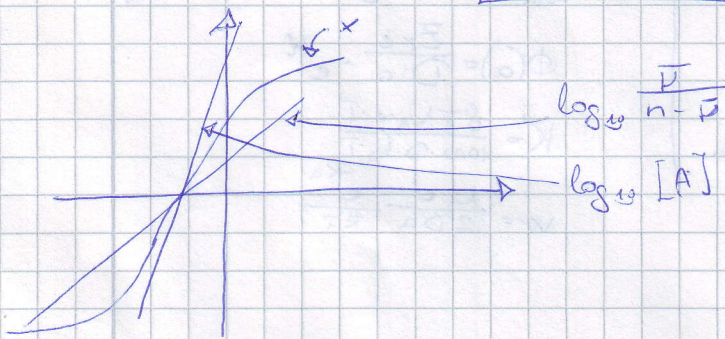
$$\bar{v} = \frac{n k [O_2]}{1 + k [O_2]} \quad ; n = 1$$

Extrém pozitív kooperativitás: Elhanyagoljuk a Donnan-potenciált és a Debye-Hückel effektust
 => csak a kötőhelyeket vizsgáljuk



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

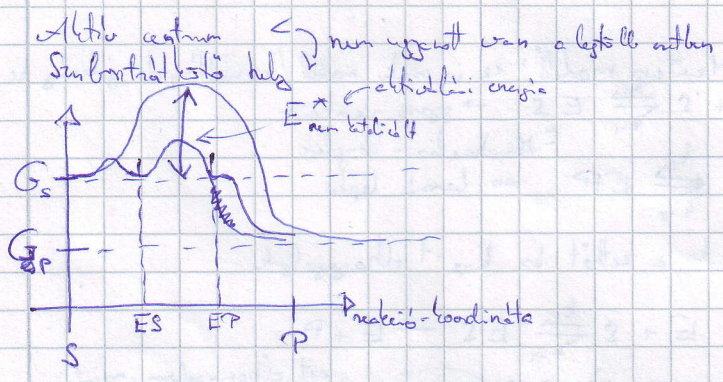
⇒ Hill egyenlet: $\bar{v} = \frac{n k [A]^x}{1 + k [A]^x}$ n: kötőhelyek száma
 $1 \leq x \leq n$ kooperativitás együtthatója.
 Extrém pozitív kooperativitás: $x = n$
 Nincs Extrém negatív kooperativitás: $x = 1$



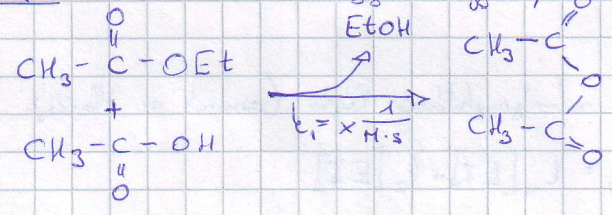
Enzimek

fehérjék → dőre meghatározott formájúak
 RNS → ribozim → fehérjék a legtöbb reakció katalizálására általában jöttek

Kofaktorok: redoxi reakciók katalizálásához mindig van szükség
 → kénion vagy vagy kénim (más molekula)
 enzim + kénim = prostetikus csoport

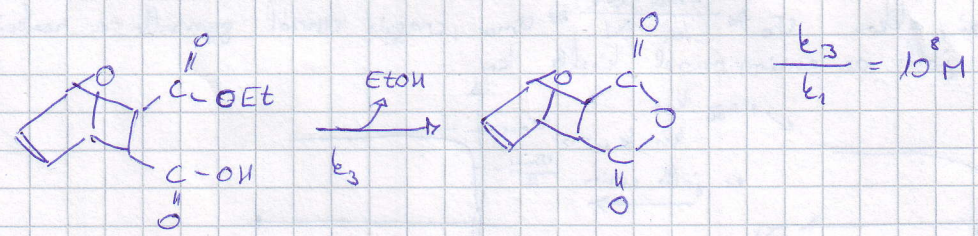
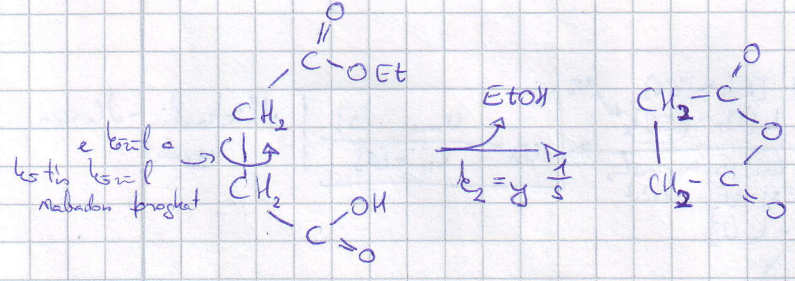


Példa: A három reakció lényegében ugyanaz, a katalizátor az, hogy az két reagens előretéren egy enzim működje



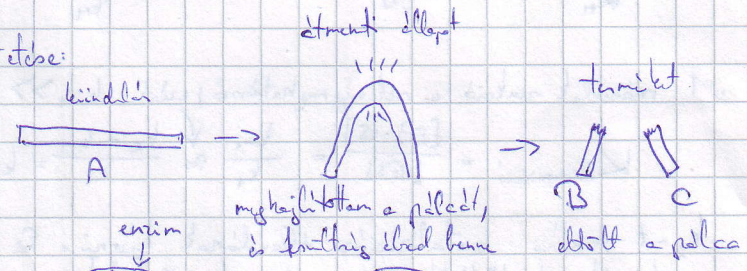
csak abból, hogy a két molekult előretéren összekapcsoltuk, a reakciósebesség 100 csomósára nőtt!

$\frac{k_2}{k_1} = 10^5 M$



Enzimek működésüket szemléltetése:

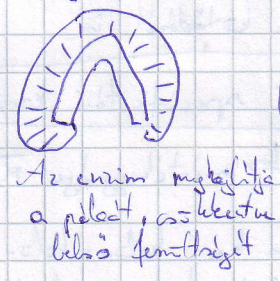
Adott egy reakció, melyben egy palack áll össze



Az enzimet egy lyukból lehet képzeltetni el, ami segít abban a botot

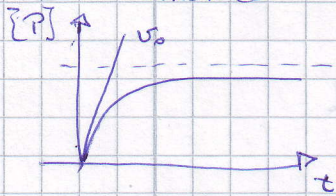


az A palack (molekulát) botot az enzimbe és abban emitt frakthig elhied

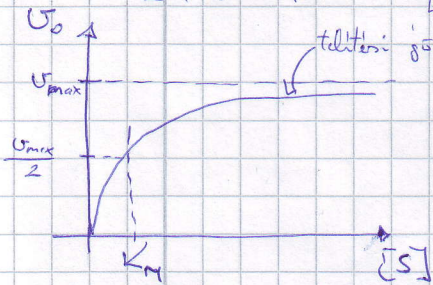
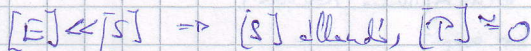
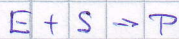
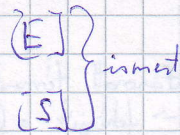


fontos, hogy a termék ne kötődjenek túl erősen az enzimhez

Enzimkinetika

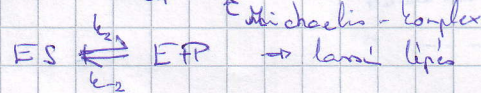
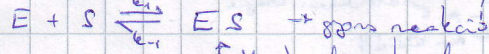


termékek képződése az enzimbe gátolja a reakciót, emiatt kezdeti valamelyest csökkenteni



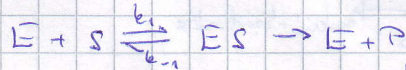
teljesen jóslható konstans

Michaelis-Menten modell: ez is csak modell/készség, de jól jellemez a legyőlt



Michaelis-komplex

Összegezzük a kétöt és k_{-2} -t elhanyagoljuk.



$[ES]$ képződési sebessége: $k_{+1}([E]_{\text{Total}} - [ES]) \cdot [S] - [ES] \leftarrow$ ezt elhanyagolom, mert $[E] \ll [S]$

lamos sebessége: $k_{-1}[ES] + k_2[ES]$

$v_0 = k_2[ES]$ ← a második reakció a sebességhatározó lépés (amire az állandója k_2)

$$[ES] \approx \text{áll.} \Rightarrow k_{+1}([E]_{\text{T}} - [ES])[S] = k_{-1}[ES] + k_2[ES]$$

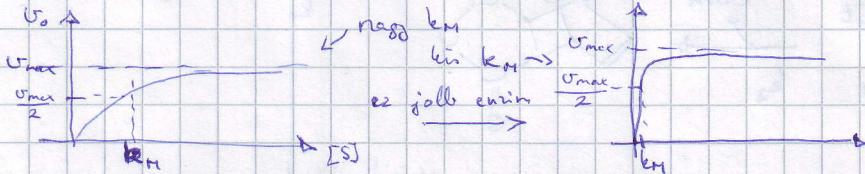
$$\Rightarrow [ES] = \frac{[E]_{\text{T}} \cdot [S]}{[S] + \frac{k_{-1} + k_2}{k_{+1}}} = \frac{[E]_{\text{T}} \cdot [S]}{k_M + [S]}$$

$$v_0 = k_2[ES] = \frac{k_2[E]_{\text{T}} \cdot [S]}{k_M + [S]}$$

mivel $[E]_{\text{T}} \gg [ES]$ ezért $k_2[E]_{\text{T}} \approx [ES]k_2$
 akkor v_0 maximális, ha $[ES] = [E]_{\text{T}}$, ezért $v_{\text{max}} = k_2[E]_{\text{T}}$

$$v_0 = \frac{v_{\text{max}} \cdot [S]}{k_M + [S]} \quad \text{Michaelis-Menten egyenlet}$$

ha k_M kicsi, akkor $v_0 \approx \frac{v_{\text{max}}}{k_M + [S]} \approx v_{\text{max}}$, vagyis annál gyorsabb a reakció, annál jobb az enzim, minél kisebb k_M



→ második reakció a sebességhatározó ezért $k_{-1} \gg k_2$

$$K_{\text{dimenzió}} = \frac{[E] \cdot [S]}{[ES]} = \frac{k_{-1}}{k_{+1}} \sqrt{\frac{k_{-1} + k_2}{k_{+1}}} = k_M \Rightarrow \left[k_M \approx \frac{k_{-1}}{k_{+1}} \right]$$

k_2 -t molis katalízis állandónak hívni. Ez az állandó jellemzi az enzim és termék kötődését is. $k_2 = k_{\text{cat}} [S]$

→ $\frac{k_{\text{cat}}}{k_M}$ specificitási konstanssal) mutatja jellemzeni az enzimet.

↳ mértékegysége: $\frac{1}{M \cdot s}$ → ez egy másodrendű reakció mértékegysége

A k_{cat} és k_M külön-külön gyakran néha mérhető, emiatt egyszerűbb csak a k_{cat}/k_M hányadosát meghatározni úgy, hogy a reakció v_0 legyen mérve a sebesség, amikor $k_M \gg [S]$

$$v_0 = \frac{k_{\text{cat}} [E]_{\text{T}} [S]}{k_M + [S]} \xrightarrow{M \gg [S]} v_0 \approx \frac{k_{\text{cat}} [E]_{\text{T}} [S]}{k_M} \leftarrow \text{mértékegysége}$$

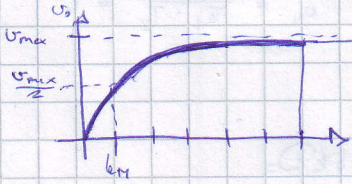
Példák "jő emelkedő"

	$k_{cat} (\frac{1}{s})$	$k_{M1} (\frac{1}{s})$	$\frac{k_{cat}}{k_{M1}}$
lizozim	0,5	$6 \cdot 10^{-6}$	$8,3 \cdot 10^3$
ribonukleá	$7,9 \cdot 10^2$	$7,9 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^5$
acetilkolin esteráz	$1,4 \cdot 10^4$	$3 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^8$

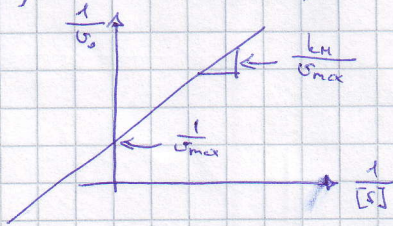
$10^8 - 10^3 \leftarrow$ ennyi jöve a diffúzió miatt
 nem nagyon érkezik el
 \rightarrow diffúzió korlátozott reakció

Specificitás: kóntas meghatározásának módjai:

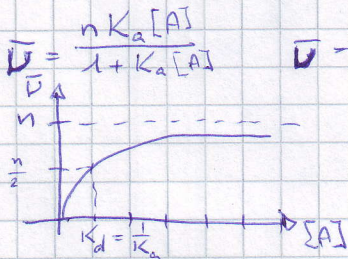
1) Újsgiminek az $5 \times k_{M1}$ -yi speltimot



2) Linearizálás: a) $\frac{1}{v_s} = \frac{k_{M1}}{v_{max}} \cdot \frac{1}{[S]} + \frac{1}{v_{max}}$ (Lineweaver-Burk-egyenlet)



b) másikkal módosított linearizálás:



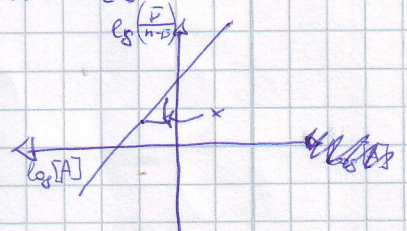
$\bar{v} = \frac{n K_a [A]}{1 + K_a [A]}$ $\bar{v} = \frac{n}{2}$ K_a : gmovalásos állandó
 n : kötőhelyek száma
 K_d : disszociációs állandó

Hill-plot: Ha kooperatív a ligandum kötés, $\bar{v} = \frac{n K [A]^x}{1 + K [A]^x}$ $1 \leq x \leq n$

$\log\left(\frac{\bar{v}}{n - \bar{v}}\right) = x \cdot \log[A] + \log K = \log\left(\frac{\bar{v}}{1 + \bar{v}/n}\right)$

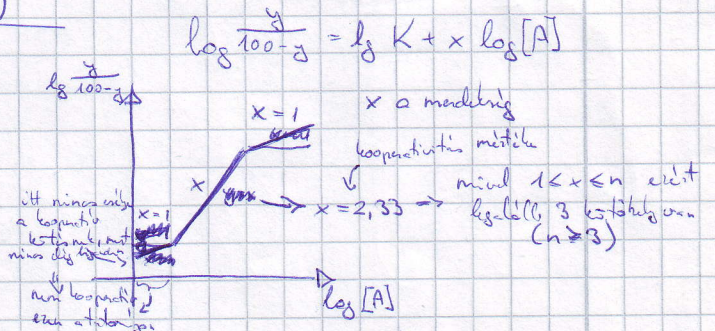
$y = \frac{\bar{v}}{n} \Rightarrow \log(y) = x \log[A] + \log K$

$0 \leq \bar{v} \leq n \Rightarrow 0 \leq y \leq 1$



Adottak alapján, ahol az értékek hogy a kötőhelyek nagy száma miatt kötődik a substrátot kooperatív módon fogadják. Mi a kooperativitás mértéke és hogyan lehet megközelíteni a vonal egyenletét?

y (%)	$[A]$ (μM)
9,1	12,6
13,7	20,0
20,1	31,6
36,0	44,7
55,7	63,1
73,8	89,1
86,3	125,9
90,9	199,5
94,1	316,2



\Rightarrow Scatchard diagrammal azonnal jöve, hogy ott teljes mértékben leírható

$\frac{\bar{v}}{[A]} = nK - \bar{v}K$

Ozmózis nyomás feladat: a) Hány elegye van a feladat és melyek ezek a molekulatömege

$30 \frac{\text{mg}}{\text{ml}}$ felhígított (több elegye)

$$20^\circ\text{C} \Rightarrow \pi_1 = 0,012 \text{ atm}$$

$$40^\circ\text{C} \Rightarrow \pi_2 = 0,0514 \text{ atm}$$

a) $\pi = R \cdot T \cdot C$

ha nő a T , akkor nő π is, de nem ennyire... $\Rightarrow C$ -nek is nőnie kellett

π kolligatív tulajdonság: csak a molekuláris töltől függ

$$\frac{\pi_2}{\pi_1} = \frac{RT_2 C_2}{RT_1 C_1} \Rightarrow \frac{C_2}{C_1} \text{ az elegyeket néme: } \frac{C_2}{C_1} = \frac{\pi_2 \cdot T_1}{\pi_1 \cdot T_2} = 4$$

b) $c_1 = \frac{\pi_1}{R \cdot T_1} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ M}$

$$M_w = \frac{30 \text{ g/l}}{c_1} = 60 \text{ kDa} \Rightarrow M_{w, \text{elegye}} = 15 \text{ kDa}$$

Szövetek, membránok, csatornák:

Szövetek: eukarióták, prokarióták

Szűrőréteg, mint

Membránok:

Szűrő - funkció

Csatornák

Kanál

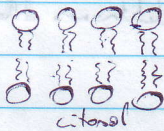
Nest egyenlet

Proton-pumpa z - bakteris sodpmin

Nernst - egyenlet:

z = töltés

Szövetmembrán:



Legjobb szövetben van K⁺ csatorna (passzív transzport)
+ Na⁺/K⁺ pumpa (ATP-ös) => aktív transzport

K⁺ koncentráció: 5 mM/l
Na⁺ koncentráció: 140 mM/l

$$\frac{Na^+_{kint}}{Na^+_{bél}} \gg 1$$

$$\Delta\phi = (U_{veg}) + 40mV$$

(ion) = 80mV
(ideg) = 70mV

Nyugalmi állapot

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln [I] \text{ joule}$$

$$\hookrightarrow \Delta G_{kint} = \Delta G^\circ + RT \ln [I]_{kint}$$

$$\hookrightarrow \Delta G_{bél} = \Delta G^\circ + RT \ln [I]_{bél}$$

$$\text{Ha 1 mol iód mozgok: } \Delta G = RT \ln [I]_{bél} - RT [I]_{kint}$$

$$1V = \frac{1 \text{ Coulomb}}{1 \text{ joule}}$$

z: az ion töltése

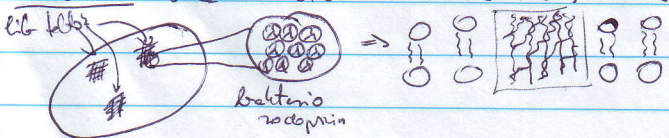
$$F: \text{Faraday-állandó: } F = 96500 \text{ joule/Volt}$$

Egyensúly: $RT \ln [I]_{bél} - RT \ln [I]_{kint} + z F V_{veg} = 0$

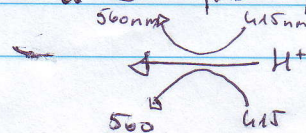
$$V_{veg} = \frac{RT}{zF} \left(\frac{[I]_{kint}}{[I]_{bél}} \right) \text{ Volt}$$

$$\Rightarrow 37^\circ C\text{-on: } V_{veg} = 62 \log_{10} \left(\frac{[I]_{kint}}{[I]_{bél}} \right) \text{ mV}$$

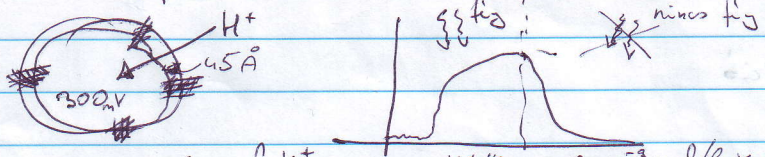
Példa: Halobacterium halobium => sóban környezetkedvelő



=> tartósan él, majd egy kis energiájú fénvet bocsát ki és kizár proton pumpa segítségével



Mérés: Szóltat lila foltok - Fosfolipid - Lecitin + víz
 => 5 medllae vezékélés, ami protonok b pumpal befelé figy hatósaie
 (pot बदतर, mit a szit, mit itt ki- hól égal be a lla felt)



Számolás: $9 \cdot 10^3 \frac{\text{mol H}^+}{\text{vezékélés ml}}$ $\frac{\text{H}^+ \#}{\text{vezékélés}} = \frac{9 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l} \times 6,02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}}{3,18 \cdot 10^{-12} \text{ vezékélés/ml}} = \frac{1703 \text{ H}^+}{\text{vezékélés}}$
 $\text{pH}_{\text{int}} = 9,00$ $\text{pH}_{\text{ext}} = 1,6$

működés kondenzátor

$q = VC$
 $C = \epsilon_0 \epsilon_r K_0 D \frac{a b}{b - a}$

- C = kapacitás
- K_0 = permeabilitás
- a = belső sugar
- b = külső sugar
- D = dielektrikus állandó = víz ~ 80

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

$|E| = \frac{V \Delta \phi}{\text{cm}} = \frac{360 \text{ mV}}{45 \cdot 10^{-10} \text{ cm}} = 790 \text{ 000 } \frac{\text{V}}{\text{cm}}$

levegő 1
 szám 1000

[Faint handwritten notes and diagrams, including a diagram of a cell membrane with various components and arrows.]