

BIOFIZIKA

ÍRÁSBELI VIZSGA

2015. január 5.

**PÁZMÁNY PÉTER
KATOLIKUS EGYETEM
INFORMÁCIÓS TECHNOLÓGIAI
ÉS BIONIKAI KAR**

Fontos tudnivalók

Tisztelt Vizsgázó!

Jelen füzet a 2014/15/1. tanulmányi időszak Biofizika írásbeli vizsgájához lett kiadva. A füzet az előadásokon elhangzott matematikai módszerek összefoglalására és az egyes típusfeladatok esetében való alkalmazásuk bemutatására hivatott.

A kiadványban bárhol előfordulhatnak hiányosságok, bővebb magyarázatra szoruló részek. Az ezek kiegészítése illetve jegyzetelés, feladatmegoldás céljából a füzet végében jegyzetoldalak találhatók.

Eredményes felkészülést kívánunk!

A kiadványt összeállította:
Naszlady Márton Bese – 2015



Ez a kiadvány a *Creative Commons Nevezd meg! – Ne add el! 4.0 Nemzetközi licenc* alá tartozik.
A licenc megtekintéséhez látogasson el a <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/> oldalra.

A kiadványban szereplő tartalmi elemek
harmadik személytől származó véleményt, értesülést tükröznek.
Az esetlegesen előforduló tárgyi tévedésekből fakadó visszás helyzetek
kialakulásáért, illetve azok következményeiért a kiadó nem vállal felelősséget!

Tartalomjegyzék

Témakörök.....	4
0. Alapvető koncentrációfajták és mennyiségi egységek	4
I. Termodinamika – energetika és egyensúly	6
II. Reakciókinetika – reakciósebesség, aktiválási energia, felezési idő	8
III. Ozmózis – ozmózisnyomás, aktivitási koefficiens	10
IV. Elektrokémia – Ionerősség, Donnan-potenciál, munkavégzés	12
V. Fehérjék és ligandumok – töltés, kooperativitás, Hill-egyenlet	14
Grafikus módszerek	15
Jegyzetek.....	17
Kémiai és fizikai állandók és értékeik.....	20

Témakörök

0. Alapvető koncentrációfajták és mennyiségi egységek

Jelölések, mértékegységek és állandók

Jelölés	Megnevezés	Mértékegység
T	abszolút hőmérséklet, $0\text{ °C} = 273\text{ K}$	K
X	móltört	1
m	molalitás	$\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$
M	molaritás	$1\text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} = 1\text{ M}$
$(w/w)\%$	tömegszázalék	100%
$(V/V)\%$	térfogatszázalék	100%
$(w/V)\%$	vegyesszázalék	100%
$m_{\square}$	anyag tömege	g
$M_{\square}$	anyag molekulatömege	$1\text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 1\text{ Da}$
$n_{\square}$	anyag anyagmennyisége	mol
$\rho_{\square}$	anyag sűrűsége	$\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$
$V_{\square}$	anyag térfogata	cm^3
$[\square]$	anyag koncentrációja	$1\text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} = 1\text{ M}$

Megjegyzendő, hogy a tömeg-, térfogat- és vegyesszázalék mennyiségek nem szabványos SI egységek, a %-jel az arány százalékban adott kifejezésére szolgál. A mennyiségek jelölése szintén csak ajánlás, lévén hogy szabványban elfogadott jelölésük nincs.

Legfontosabb egyenletek

Tömeg, molekulatömeg, anyagmennyiség, sűrűség és térfogat közti összefüggés

$$n_X = \frac{m_X}{M_X}, \quad m_X = n_X \cdot M_X, \quad M_X = \frac{m_X}{n_X}$$

$$\rho_X = \frac{m_X}{V_X}, \quad m_X = \rho_X \cdot V_X, \quad V_X = \frac{m_X}{\rho_X}$$

Móltört (X)

$$X := \frac{n_2}{n_1 + n_2}$$

ahol n_2 az oldott anyag, n_1 az oldószer mólokban kifejezett anyagmennyisége.

Molalitás (m)

$$m := \frac{n_2}{m_1} \left[\frac{\text{mol}}{\text{kg}} \right]$$

ahol n_2 az oldott anyag mólokban kifejezett anyagmennyisége, m_1 az oldószer kilogrammokban kifejezett tömege.

Molaritás (M)

$$M := \frac{n_2}{V_0} \left[\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \right]$$

ahol n_2 az oldott anyag mólokban kifejezett anyagmennyisége, V_0 az oldat térfogata.

Tömegszázalék ($(w/w)\%$)

$$w = \frac{m_2}{m_1 + m_2}$$

ahol m_2 az oldott anyag, m_1 pedig az oldószer grammokban kifejezett tömege. A tömegszázalék a tömeghányad (w) 100%-al normált értéke:

$$(w/w)\% = w \cdot 100\%$$

Térfogatszázalék ($(V/V)\%$)

$$\varphi = \frac{V_2}{V_0}$$

ahol V_2 az oldott anyag, V_0 pedig az oldat köbcentiméterekben kifejezett térfogata. A térfogatszázalék a térfogathányad (φ) 100%-al normált értéke:

$$(V/V)\% = \varphi \cdot 100\%$$

Vegyesszázalék ($(w/V)\%$)

$$(w/V)\% = \frac{m_2}{V_0} \cdot 100\%$$

ahol m_2 az oldott anyag grammokban kifejezett tömege, V_0 pedig az oldat köbcentiméterekben kifejezett térfogata.

Példák

1. feladat

0,6 g karbamidot (ureát) feloldunk 500 ml vízben. Mekkora lesz a karbamid móltörtje, molalitása és molaritása? A karbamid molekulatömege $M_w = 60 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ és az oldatkészítés során fellépő térfogatváltozást elhanyagoljuk.

Megoldás:

$$\text{Tfh. } \rho_{\text{H}_2\text{O}} = 1 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}} = 500 \text{ cm}^3 \cdot 1 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} = 500 \text{ g}$$

$$M_w = 60 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$M_{\text{H}_2\text{O}} = 18 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$n_1 = \frac{m_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{500 \text{ g}}{18 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 27,78 \text{ mol}$$

$$n_2 = \frac{m_w}{M_w} = \frac{0,6 \text{ g}}{60 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 0,01 \text{ mol}$$

$$X = \frac{0,01 \text{ mol}}{27,79 \text{ mol}} = 3,598 \cdot 10^{-4}; \quad m = \frac{0,01 \text{ mol}}{0,5 \text{ kg}} = 0,02 \frac{\text{mol}}{\text{kg}}; \quad M = \frac{0,01 \text{ mol}}{0,5 \text{ dm}^3} = 0,02 \text{ M}$$

I. Termodinamika – energetika és egyensúly

Jelölések, mértékegységek és állandók

Jelölés	Megnevezés	Mértékegység
ΔG	Gibbs-féle szabadentalpia	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
ΔH	entalpiaváltozás	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
ΔS	entrópia	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
ΔG^0	standard szabadentalpia-változás	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
R	egyetemes gázállandó, $R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
K_e	egyensúlyi állandó	1
μ	anyag kémiai potenciálja	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
μ^0	tiszta anyag kémiai potenciálja	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
$dn_{\square}$	anyagmennyiség-megváltozás	1

Legfontosabb egyenletek

Gibbs-féle szabadentalpia

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad \Delta G = \Delta G^0 + RT \ln(K_e) \quad \Delta G = \sum_i \mu_i dn_i = (\mu_A dn_A + \mu_B dn_B)$$

Standard szabadentalpia-változás egyensúlyban

Egyensúlyban az anyagok kémiai potenciálja egyenlő. Ez két anyag esetén azt jelenti, hogy

$$\mu_A = \mu_B$$

Ebből következik, hogy

$$\Delta G = 0 \quad \Delta G^0 = -RT \ln(K_e) \quad K_e = \frac{[B]_e}{[A]_e}$$

Kémiai potenciál, az elektromos hatások elhanyagolásával

$$\mu = \mu_0 + RT \ln(X)$$

Példák

1. feladat

Az $A \rightleftharpoons B$ reakció standard szabadentalpiája 15°C -on $\Delta G^0 = 27 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$. Mi az egyensúlyi állandó értéke? Milyen irányban megy végbe a reakció, ha kezdetben A és B koncentrációja azonos?

Megoldás:

$$R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$T = 273 \text{ K} + 15 \text{ K} = 288 \text{ K}$$

$$\Delta G^0 = -RT \ln(K_e)$$

$$K_e = ?$$

$$27 \cdot 10^3 = -RT \ln(K_e)$$

$$\ln(K_e) = \frac{27 \cdot 10^3}{-8,314 \cdot 288} = -11,27$$

$$K_e = e^{-11,27} = 1,267 \cdot 10^{-5}$$

$$K_e = \frac{[B]_e}{[A]_e} < 1 \Rightarrow [B]_e < [A]_e \quad \text{vagyis a reakció } B \rightarrow A \text{ irányban folyik.}$$

2. feladat

A glükóz-1-foszfát (G1P) $\rightleftharpoons$ glükóz-6-foszfát (G6P) izomerizációs reakció esetén a standard szabadentalpia-változás értéke $\Delta G^0 = -7,1 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ (25 °C-on mérve). Ha a reakció elején 1 mol G1P van a rendszerben, akkor az egyensúly beállta után hány mol G1P és hány mol G6P lesz jelen?

Megoldás:

$$R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$T = 273 \text{ K} + 15 \text{ K} = 288 \text{ K}$$

$$\Delta G^0 = -7,1 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$n_{\text{G1P},e} = ?$$

$$n_{\text{G6P},e} = ?$$

$$\Delta G^0 = -RT \ln(K_e), \quad K_e = \frac{[\text{G6P}]_e}{[\text{G1P}]_e}$$

$$-\frac{\Delta G^0}{RT} = \ln(K_e) \rightarrow K_e = e^{-\frac{\Delta G^0}{RT}}$$

$$K_e = e^{-\frac{-7100}{8,314 \cdot 298}} = 17,558$$

Kiindulási állapot:

$$n_{\text{G6P}} = 0 \text{ mol}, \quad n_{\text{G1P}} = 1 \text{ mol}, \quad \text{azaz összesen } n = 0 \text{ mol} + 1 \text{ mol} = 1 \text{ mol}$$

Az egyensúly beálltakor:

$$\frac{n_{\text{G6P},e}}{n_{\text{G1P},e}} = K_e = 17,558 \rightarrow n_{\text{G6P},e} = \frac{17,558}{18,558} \text{ mol} = 946 \text{ mmol G6P}$$

$$\rightarrow n_{\text{G1P},e} = 1 - n_{\text{G6P},e} = 53,9 \text{ mmol G1P}$$

II. Reakciókinetika – reakciósebesség, aktiválási energia, felezési idő

Jelölések, mértékegységek és állandók

Jelölés	Megnevezés	Mértékegység
v	reakciósebesség	$\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} = \text{M} \cdot \text{s}^{-1}$
n	reakció rendűsége	1
k	reakciósebességi állandó	$\text{s}^{-1} \cdot \text{M}^{-n+1}$
λ	bomlási állandó	$\text{s}^{-1} \cdot \text{M}^{-n+1}$
e	Euler-féle szám	$e = 2,718$
t	idő	s
τ	relaxációs idő	s
$t_{1/2}$	felezési idő	s
A	preexponenciális tényező	1
E^*	aktiválási energia	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$

Legfontosabb egyenletek

Reakciósebességi egyenlet az $A \rightarrow B$ irányú reakcióra

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

Felezési- és relaxációs idő

$$[A] = [A]_0 \cdot e^{-kt} = [A]_0 \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} = [A]_0 \cdot e^{-\lambda t}$$

$$\tau = \frac{1}{k} = \frac{1}{\lambda}$$

Aktiválási energia

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

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

Példák

1. feladat

Egy radioaktív izotóp mennyisége 10 perc alatt csökken az eredeti érték negyedére. Mennyi a bomlási állandó értéke? Mennyi a reakció felezési ideje?

Megoldás:

$$[A]_0 = 4[A]$$

$$t = 10 \text{ min}$$

$$\lambda = ?$$

$$t_{1/2} = ?$$

$$[A] = [A]_0 \cdot e^{-\lambda t}, \quad 4[A] = [A]_0 \cdot e^{-\lambda \cdot 0} = [A]_0$$

$$e^{-\lambda t} = \frac{1}{4} \rightarrow -\lambda t = \ln\left(\frac{1}{4}\right) \rightarrow \lambda = -\frac{\ln(1/4)}{10 \text{ min}}$$

$$\lambda = \frac{1,386}{600 \text{ s}} = 2,31 \cdot 10^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$[A] = \frac{[A]_0}{2} = e^{-\lambda t_{1/2}} \cdot [A]_0 \rightarrow e^{-\lambda t_{1/2}} = \frac{1}{2} \rightarrow t_{1/2} = \frac{\ln(2)}{-\lambda} = \frac{-0,693}{-2,31 \cdot 10^{-3}} = 300 \text{ s}$$

2. feladat

Egy reakció sebessége a tízszeresére nő, ha a hőmérséklet 10 °C-ról 17 °C-ra nő. Mennyi a reakció aktiválási energiája? A preexponenciális tényező hőmérsékletfüggését elhanyagoljuk.

Megoldás:

$$T_1 = 10\text{ °C} = 283\text{ K}$$

$$T_2 = 17\text{ °C} = 290\text{ K}$$

$$k_1 = 0,1\text{ } k_2$$

$$E^* = ?$$

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

$$k_1 = A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT_1}}, \quad 10k_1 = k_2 = A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT_2}}$$

$$\frac{1}{10} = \frac{A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT_1}}}{A \cdot e^{-\frac{E^*}{RT_2}}} \rightarrow e^{-\frac{E^*}{RT_2}} = 10 \cdot e^{-\frac{E^*}{RT_1}}$$

$$-\frac{E^*}{RT_2} = \ln(10) - \frac{E^*}{RT_1}$$

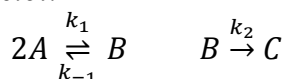
$$-4,147 \cdot 10^{-4} \cdot E^* = 2,3 - 4,25 \cdot 10^{-4} \cdot E^*$$

$$0,103 \cdot 10^{-4} \cdot E^* = 2,3$$

$$E^* = \frac{2,3}{0,103 \cdot 10^{-4}} = 223300 \frac{\text{J}}{\text{mol}} = 223 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

3. feladat

Tekintsük a következő összetett reakciót:



Írja föl a reakció sebességi egyenletét, ha tudjuk, hogy

$$k_2 \ll k_{-1} = \frac{k_1}{4}$$

Megoldás:

$$\left. \begin{array}{l} v_1 = k_1[A]^2 = k_{-1}[B] \\ v_2 = k_2[B] \end{array} \right\} \text{ és } k_2 \ll k_1 \text{ ismeretében a sebesség-meghatározó a } B \rightarrow C \text{ reakció}$$

$$v_b = v_2 = k_2[B]$$

$$k_{-1}[B] = k_1[A]^2 \rightarrow [B] = \frac{k_1[A]^2}{k_{-1}} = \frac{k_1[A]^2}{\frac{k_1}{4}} = 4[A]^2$$

$$v_b = k_2 \cdot 4[A]^2$$

III. Ozmózis – ozmózisnyomás, aktivitási koefficiens

Jelölések, mértékegységek és állandók

Jelölés	Megnevezés	Mértékegység
Π	ozmózisnyomás	$1 \text{ atm} = 1,013 \cdot 10^6 \text{ din} \cdot \text{cm}^{-2}$
V	térfogat	$1 \text{ dm}^3 = 1 \text{ L}$
R	egyetemes gázállandó, $R = 0,0821 \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$	$\text{L} \cdot \text{atm} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
c	koncentráció	$\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$
$\overline{V}_1^0$	anyag parciális moláris térfogata*	$\text{L} \cdot \text{mol}^{-1}$
γ_1	aktivitási koefficiens*	1
h	szintkülönbség a folyadékfelszínek között	cm
g	nehézségi gyorsulás, $g = 9,8 \cdot 10^2 \frac{\text{cm}}{\text{s}^2}$	$\text{cm} \cdot \text{s}^{-2}$

* a jelölés alsóindexében lévő 1-es azt jelenti, hogy a mennyiség híg vizes oldatra vonatkozik.

Legfontosabb egyenletek

Ozmózisnyomás egyenlete az aktivitási koefficiens elhanyagolásával

$$\Pi = RT \sum_i c_i$$

Ozmózisnyomás (bővített) egyenlete

$$\Pi = RT \sum_i c_i + \frac{RT}{\overline{V}_1^0} \cdot \ln \gamma_1$$

Hidrosztatikai nyomásból fellépő ozmózisnyomás

$$\Pi = \rho h g$$

Példák

1. feladat

Egy fehérjét, ($M_w = 45 \text{ kDa}$) $10 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$ koncentrációban feloldunk vízben és megmérjük az ozmózisnyomását 22°C -on, ami $2,152 \cdot 10^{-2} \text{ atm}$ -nak adódik. Hány nátriumion disszociál le egy fehérjemolekuláról?

Megoldás:

$$T = 22^\circ\text{C} = 295 \text{ K}$$

$$M_w = 45 \cdot 10^3 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$w = 10 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$$

$$\Pi = 2,152 \cdot 10^{-2} \text{ atm}$$

$$N_{\text{Na}^+} = ?$$

$$\Pi = RT \sum_i c_i \rightarrow \sum_i c_i = \frac{\Pi}{RT}$$

$$\sum_i c_i = \frac{2,152 \cdot 10^{-2} \text{ atm}}{0,0821 \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 295 \text{ K}} = 8,88 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$c_{\text{fehérje}} = \frac{w}{M_w} = \frac{10 \text{ g/L}}{45000 \text{ g/mol}} = 2,22 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$\sum_i c_i = c_{\text{fehérje}} + c_{\text{Na}^+} \rightarrow c_{\text{Na}^+} = 6,66 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

Vagyis az adódik, hogy pl. 1 m^3 oldatban 888 mmol részecskéből 222 mmol fehérje, és 666 mmol részecske Na^+ . Ez azt jelenti, hogy fehérjénként 3 db Na^+ disszociál.

2. feladat

Egy ozmóméter egyik cellájába egy 40 kDa molekulatömegű fehérjéből $4 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$ koncentrációjú oldatot töltünk.

- a) Mi lesz a fehérjeoldat ozmózisnyomása 22°C -on tiszta vízzel szemben, ha egy fehérjemolekuláról 2 Na^+ ion disszociál?
- b) Mi lesz a fehérjeoldat ozmózisnyomása 22°C -on $0,2 \text{ mM}$ NaCl oldattal szemben, ha egy fehérjemolekuláról 2 Na^+ ion disszociál?

Megoldás:

$$T = 22^\circ\text{C} = 295 \text{ K}$$

$$M_w = 40 \cdot 10^3 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$w = 4 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$$

$$N_{\text{Na}^+} = 2$$

$$c_2 = 0,2 \text{ mM}$$

$$\Pi_a = ?$$

$$\Pi_b = ?$$

a) részfeladat:

$$\Pi_a = RT \sum_i c_i = RT \cdot 3 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L}} = 0,0821 \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 295 \text{ K} \cdot 3 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$\Pi_a = 7,266 \cdot 10^{-3} \text{ atm}$$

b) részfeladat:

Az ozmózisnyomást az egyensúlyi állapot beálltakor mérjük. Egyensúlyban a kompartmentek közt szabadon átjáró anyagok kémiai potenciálja egyenlő, vagyis

$$\mu_{\text{NaCl},A} = \mu_{\text{NaCl},B}$$

Jelöljük a kezdetben a kompartmentekben lévő anyagokat a következő módon:

$$[P^{2-}]_A = a, \quad [\text{NaCl}]_B = b$$

Az egyensúly beálltakor a NaCl kémiai potenciálja kiegyenlítődik, mégpedig azért, hogy a B kompartmentből Cl^- ionok áramlanak az A kompartmentbe. Ez azt jelenti, hogy

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

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

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

$$2ax + 2bx = b^2$$

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

$$x = \frac{1}{2} \frac{b^2}{a + b}$$

Vagyis az ozmózisnyomás:

$$\Pi_b = RT[(a + 2a + x + x) - (b - x + b - x)] = RT(3a + 2x - 2b + 2x)$$

$$\Pi_b = RT \left(3a - 2b + 2 \frac{b^2}{a + b} \right)$$

Ebbe behelyettesítve a kiindulási adatokat:

$$\Pi_b = RT \left(3 \cdot 10^{-4} - 2 \cdot 0,2 \cdot 10^{-3} + 2 \frac{(0,2 \cdot 10^{-3})^2}{3 \cdot 10^{-4} + 0,2 \cdot 10^{-3}} \right) \frac{\text{mol}}{\text{L}} = RT \frac{1}{6000} \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$\Pi_b = 0,0821 \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 295 \text{ K} \cdot \frac{1}{6000} \frac{\text{mol}}{\text{L}} = 4,037 \cdot 10^{-3} \text{ atm}$$

IV. Elektrokémia – Ionerősség, Donnan-potenciál, munkavégzés

Jelölések, mértékegységek és állandók

Jelölés	Megnevezés	Mértékegység
I	ionerősség	$1 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} = 1 \text{ M}$
C	koncentráció	$1 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} = 1 \text{ M}$
z	töltésszám	1
$\Delta\Phi_D$	Donnan-potenciál	$1 \text{ V} = 1 \text{ J} \cdot \text{C}^{-1}$
$\mathcal{F}$	moláris töltés állandója, $\mathcal{F} = 96\,485 \frac{\text{C}}{\text{mol}}$	$\text{C} \cdot \text{mol}^{-1}$
W	munkavégzés	J
N_a	Avogadro-szám, $N_a = 6 \cdot 10^{23}$	1
e	elektron töltése, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	C
D	dielektromos állandó	$\text{C} \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$
r	távolság	m
$\overline{\Delta G}$	parciális moláris energia	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
$n_{\rightarrow}$	kijuttatott anyagmennyiség	mol

Legfontosabb egyenletek

Ionerősség

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

Donnan-potenciál

$$\Delta\Phi_D = -\frac{RT}{z\mathcal{F}} \cdot \ln\left(\frac{[c_+]_A}{[c_+]_B}\right)$$

ahol $[c_+]$ az egyes kompartmentekben lévő ionkoncentrációt jelenti.

Munkavégzés

$$W = z \cdot N_a \cdot e \cdot \phi = z \cdot \mathcal{F} \cdot \phi$$

ahol ϕ a potenciálkülönbséget jelenti.

Potenciál helyfüggése

$$\phi = \frac{z}{Dr}$$

Szabadenergia

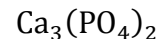
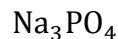
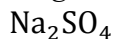
$$\overline{\Delta G} = RT \ln\left(\frac{[c_+]_{\text{ex}}}{[c_+]_{\text{in}}}\right) - z\mathcal{F}\Delta\Phi \qquad \Delta G = n_{\rightarrow} \cdot \overline{\Delta G}$$

ahol $[c_+]_{\text{ex}}$ a külső, $[c_+]_{\text{in}}$ a belső térben lévő ionkoncentráció.

Példák

1. feladat

Milyen töménységű oldat kell készíteni a következő anyagokból ahhoz, hogy ionerősségük 1 M NaCl oldaténak feleljen meg?



Megoldás:

$$1 \text{ M NaCl} \rightarrow 1 \text{ M Na}^+ + 1 \text{ M Cl}^- \Rightarrow I = \frac{1}{2}(1 \cdot 1 + 1 \cdot 1) = \frac{1}{2} \cdot 2 = 1 \text{ M}$$

Ahhoz, hogy a fenti anyagokból ilyen ionerősségű oldatot készíthessünk, keressük az

$$\frac{1}{2} \sum_i c_i z_i^2 = \frac{1}{2}(a \cdot z_a^2 + b \cdot z_b^2) = 1 \text{ M}$$

egyenlet megoldását az alábbi esetekben:

$$\text{CaCl}_2 \rightarrow \text{Ca}^{2+} + 2 \text{Cl}^- \Rightarrow \frac{1}{2}(C \cdot 1 + 2C \cdot 1) = 1 \text{ M} \Rightarrow C = \frac{1}{2} \text{ M}$$

$$\text{Na}_2\text{SO}_4 \rightarrow 2 \text{Na}^+ + \text{SO}_4^{2-} \Rightarrow \frac{1}{2}(2C \cdot 1 + C \cdot 2) = 1 \text{ M} \Rightarrow C = \frac{1}{2} \text{ M}$$

$$\text{CuSO}_4 \rightarrow \text{Cu}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} \Rightarrow \frac{1}{2}(C \cdot 2 + C \cdot 2) = 1 \text{ M} \Rightarrow C = \frac{1}{2} \text{ M}$$

$$\text{Na}_3\text{PO}_4 \rightarrow 3\text{Na}^+ + \text{PO}_4^{3-} \Rightarrow \frac{1}{2}(3C \cdot 1 + C \cdot 3) = 1 \text{ M} \Rightarrow C = \frac{1}{3} \text{ M}$$

$$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 \rightarrow 3\text{Ca}^{2+} + 2\text{PO}_4^{3-} \Rightarrow \frac{1}{2}(3C \cdot 2 + 2C \cdot 3) = 1 \text{ M} \Rightarrow C = \frac{1}{6} \text{ M}$$

2. feladat

Egy sejt nyugvó membránpotenciálja 20 °C-on −80 mV. A sejtén kívüli térben a káliumionok koncentrációja 200 mM. Mekkora a sejtén belüli káliumion-koncentráció, ha a membrán szabadon átjárható a káliumionok számára?

Megoldás:

$$T = 20 \text{ °C} = 293 \text{ K}$$

$$C_{\text{ex}} = 200 \text{ mM}$$

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

$$C_{\text{in}} = ?$$

$$\Delta\Phi = -\frac{RT}{zF} \cdot \ln\left(\frac{C_{\text{in}}}{C_{\text{ex}}}\right)$$

$$\frac{C_{\text{ex}}}{C_{\text{in}}} = e^{\Delta\Phi \cdot \frac{zF}{RT}}$$

$$C_{\text{in}} = \frac{C_{\text{ex}}}{e^{\Delta\Phi \cdot \frac{zF}{RT}}} = \frac{200 \text{ mM}}{e^{\frac{-80 \text{ mV} \cdot 96485 \frac{\text{C}}{\text{mol}}}{8,341 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}}}} = 0,2 \text{ M} \cdot e^{3,169} = 4,755 \text{ M}$$

V. Fehérjék és ligandumok – töltés, kooperativitás, Hill-egyenlet

Jelölések, mértékegységek és állandók

Jelölés	Megnevezés	Mértékegység
$\bar{v}$	telítés	1
$[]_k, []_b, []_{sz}$	kötött, bemért, szabad koncentráció	$1 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} = 1 \text{ M}$
K	kötési állandó	M^{-1}
n	kötőhelyek száma	1
w	állandó, $w = 0,1$	1
Z	fehérje töltésszáma	1
z	ligandum töltésszáma	1
ζ	fehérje nettó töltése (ligandum nélkül)	1
X	kooperativitás	1

Legfontosabb egyenletek

Kötési állandó

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

Telítés definíciós egyenlete

$$\bar{v} = \frac{[A]_k}{[P]} = \frac{[A]_b - [A]_{sz}}{[P]}$$

Fehérje töltése

$$Z = \zeta + \bar{v}z$$

Kötőhelyek száma és kötés állandó

Semleges fehérje esetében

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

Töltött fehérje esetében

$$\frac{\bar{v}}{[A]_{sz} \cdot e^{-2wZz}} = nK - \bar{v}K$$

Kooperativitás

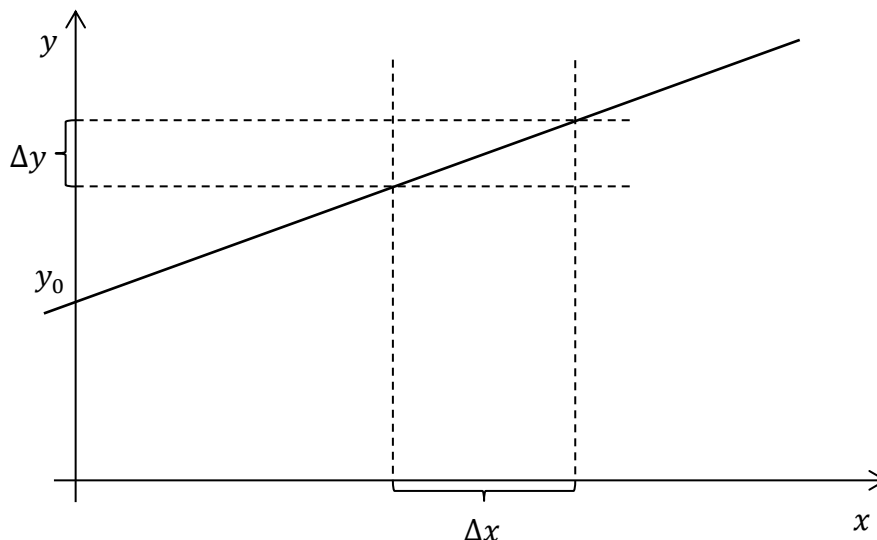
$$\lg \left(\frac{\bar{v}}{n - \bar{v}} \right) = \lg K + X \cdot \lg [L]_{sz}$$

Hill-egyenlet

$$\bar{v} = \frac{nK[A]^X}{1 + K[A]^X}$$

Grafikus módszerek

Anatómia



Az ábrán látható görbe felépítése és betűzése a következő:

y	oordináta	x	abszcissza
Δy	függőleges eltérés	Δx	vízszintes eltérés
y_0	függőleges tengely metszéspontja	x_0	zérushely

A leolvasható értékekből kapható a meredekség:

$$m = \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

Egy egyenes egyenlete a fenti jelölésekkel:

$$y = y_0 + mx$$

Mennyiségek grafikus meghatározása

A módszer a következő: az ismert adatokból olyan összefüggéseket használva, melyek egyszerűsítésével és átrendezésével az alapegyenletet kapjuk, meghatározzuk az ábrázolandó mennyiségeket. Ábrázolás után leolvassuk az m , x_0 , y_0 értékeket, melyek jelentése a táblázatból kiolvasható.

ΔH^0 meghatározása T és K ismeretében

Alapegyenlet:

$$\ln K = \frac{\Delta S^0}{R} + \frac{-\Delta H^0}{R} \frac{1}{T}$$

Ábrázolandó mennyiségek

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

$$y = \ln K$$

Leolvasható mennyiségek

$$m = \frac{-\Delta H^0}{R}$$

$$y_0 = \frac{\Delta S^0}{R}$$

Rendűség és K meghatározása $[A]_0$ és v_0 ismeretében

Alapegyenlet:

$$\ln v_0 = \ln K + n \cdot \ln[A]_0$$

Ábrázolandó mennyiségek

$$x = \ln[A]_0$$

$$y = \ln v_0$$

Leolvasható mennyiségek

$$m = n$$

$$y_0 = \ln K$$

K meghatározása $[A]$ és t ismeretében

Alapegyenlet:

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

Ábrázolandó mennyiségek

$$x = t$$

$$y = \frac{1}{n} \frac{1}{[A]}$$

Leolvasható mennyiségek

$$m = K$$

$$y_0 = \frac{1}{n} \frac{1}{[A]_0}$$

Kötőhelyek és kötési állandók meghatározása $[A]_b$ és $[A]_{sz}$ ismeretében

Alapegyenlet:

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

Ábrázolandó mennyiségek

$$x = \bar{v}$$

$$y = \frac{\bar{v}}{[A]_{sz}}$$

Leolvasható mennyiségek

$$m = -K$$

$$x_0 = n$$

Kooperativitás meghatározása $\bar{v}$, n és $[L]_{sz}$ ismeretében

Alapegyenlet:

$$\lg\left(\frac{\bar{v}}{n - \bar{v}}\right) = \lg K + X \cdot \lg([L]_{sz})$$

Ábrázolandó mennyiségek

$$x = \lg\left(\frac{\bar{v}}{n - \bar{v}}\right)$$

$$y = \lg([L]_{sz})$$

Leolvasható mennyiségek

$$m = X$$

$$y_0 = \lg K$$

Ennél az ábrázolásnál előfordulhat, hogy a kapott görbe nem egyenes, hanem egyenes szakaszokból áll. Ez esetben a szakaszokra külön-külön érvényesek a fentiek, a szakaszok jelentését pedig a feladat körülményeinek megfelelően kell értelmezni.

Jegyzetek

Kémiai és fizikai állandók és értékeik

Abszolút nulla fok

$$T_0 = 0 \text{ K} = -273 \text{ }^\circ\text{C}$$

Egyetemes gázállandó

$$R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 0,0821 \frac{\text{L} \cdot \text{atm}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

Euler-féle szám

$$e = 2,718$$

Nehézségi gyorsulás

$$g = 9,8 \cdot 10^2 \frac{\text{cm}}{\text{s}^2}$$

Moláris töltés állandója

$$\mathcal{F} = 96\,485 \frac{\text{C}}{\text{mol}}$$

Avogadro-szám

$$N_a = 6 \cdot 10^{23}$$

Elektron töltése

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$