Biofizika II.

Előadó: Derényi Imre

Terem: 5-501
H 9^{00} – 10^{00}

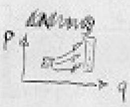
- PET → Csak anal. vagy cseréd válasz
- CMRI: T, T₂ (?) szignál ad infot
- Koppanás belőle kép
- EEG: Pyramis sejtek dipólusa

[EA1]

Kanonikus egyenletek
$$\dot q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad H = \frac{mv^2}{2} = \ldots$$
$$\dot p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

Kontinuitási egyenlet:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla j = 0 \Rightarrow \nabla j = \nabla \varrho \begin{pmatrix}\dot q\\ \dot p\end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n}\left[\partial q_i(\varrho \dot q_i) + \partial p_i(\varrho \dot p_i)\right] =$$



$$= \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial \varrho}{\partial q_i}\dot q_i + \frac{\partial \varrho}{\partial p_i}\dot p_i\right) + \sum_{i=1}^{n}\left(\varrho\frac{\partial \dot q_i}{\partial q_i} + \varrho \frac{\partial \dot p_i}{\partial p_i}\right)$$

$$\nabla j = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial \varrho}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \varrho}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)$$

Poisson zárójel: $\{\varrho, H\}$

$$\dot q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \Big| \quad \frac{\partial \dot q_i}{\partial q_i} = \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i}$$
$$\dot p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \Big| \quad \frac{\partial \dot p_i}{\partial p_i} = -\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i}$$

$$\frac{d\varrho}{dt} = \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \sum \frac{\partial \varrho}{\partial q_i}\dot q_i$$

$\frac{\partial \varrho}{\partial t}$: Idő szerinti parciális derivált: adott helyen hogy változik a sűrűség

$\frac{d\varrho}{dt}$: Idő szerinti teljes derivált: az együtt mozgó koordináta rendszerben (ha együtt mozgunk a rendszerrel akkor hogyan változik a sűrűség)

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla j = 0$$
$$\frac{d\varrho}{dt} = 0 \Rightarrow \text{Liouville tétel}: \frac{d\varrho}{dt} = 0$$

Ergodikus hipotézis:

Ergodicitás: A teljes rendszer eloszlása megegyezik egy részrendszerének eloszlásával

A rendszer a teljes fázistér bejárása során minden állapot azonos valószínűséggel szerepel (mikrokanonikus rendszer)

Ha kezdetben egyenletes volt az eloszlás ⇒ bármely pillanatban az is lesz (a sűrűség fv. az eloszlás időben állandó)

pl:

- Mikrokanonikus sokaság:
  - Teljes fázistérben sok kis részrendszer van

A rendszer hosszú idő elteltével minden állapotban azonos valószínűséggel lesz megtalálható

A sűrűségfg.-e csak az energiától függ $\varrho = \varrho(H)$

1

- Kanonikus eloszlás:

A teljes rendszeren belül egy kis részrendszert vizsg.

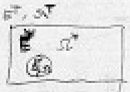
A teljes rendszer a kis részrendszer környezeteként van jelen

(E^T: Teljes rendszer energiája, Ω^T: teljes rendszer mikroállapotainak száma)

- A teljes rendszert felbontjuk a lehetséges mikroállapotaira,

(Ω^T: a teljes rendszer mikroállapotainak száma (T: a teljes rendszert jelöli))

$S^T = k_B \ln \Omega^T$ ← az entrópiája a teljes rendszernek



$$E^T = E + E^*, \qquad S^T = k_B \ln \Omega^T$$
$$S^* = k_B \ln \Omega^*$$
$$S = k_B \ln \Omega$$

P_i: Egyetlen adott állapot valószínűsége

$$P_i = \frac{\text{kedvező esetek száma}}{\text{összes esetek száma}} = \frac{\Omega^*(E^T - E_i)}{\Omega^T E^T}$$

← A környezet lehetséges állapotai amikor a kis rendszerünk a kiadott állapotban volt (A kis részrendszer egy adott állapotával)

Ha a kis rendszer nem kapna energiát akkor a környezet állapotainak száma

$$P_i = \frac{\Omega^* E^T}{\Omega^T E^T}\exp\left[\frac{S^*(E^T - E_i)}{k_B} - \frac{S^* E^T}{k_B}\right]$$

$(S^*(E^T - E_i))$

$$P_i = \frac{\Omega^* E^T}{\Omega^T E^T}\exp\left[\frac{1}{k_B}\frac{\partial S^* E^T}{\partial E}(-E_i)\right]$$

Stat. fizikában: A hőmérséklet: Az entrópia energia szerinti deriváltjának az reciproka

$$P_i = \frac{\Omega^* E^T}{\Omega^T E^T} e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \qquad \frac{1}{T} = \frac{\partial S^* E^T}{\partial E}$$

$$P_i \propto e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$$

A külvilág egyetlen dolga: T hőmérséklet biztosítja a (fürdő)

⇒ A kanonikus eloszlás:

$$P_i = \frac{e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}{\sum_j e^{-\frac{E_j}{k_B T}}}$$

[EA2]

- Mikrokanonikus sokaság: (sok kis rendszer együttese)

Adott állapot valószínűsége:

$$P_i = \frac{1}{\Omega(E, V, \{N_i\})} \quad \Big| \quad E, V, \{N_i\} = \text{áll.}$$

energia, térfogat, részecskék száma

összes állapotok száma: $\sum_i 1$ (mikrokanonikus állapotösszeg)

- Kanonikus sokaság: $\Omega + \Omega^* = \Omega^T$

(Nagy hőtartályban egy kis részrendszer)

$$P_i = \frac{e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}{\sum_j e^{-\frac{E_j}{k_B T}}}$$

← ez az állapotösszeg: Z

Adott állapot valószínűsége

Annak valószínűsége, hogy a kis rendszer E energiájú

$$P(E) = \frac{e^{-\frac{E}{k_B T}}}{Z}\Omega = \frac{e^{-\frac{E}{k_B T}}}{\sum_j e^{-\frac{E_j}{k_B T}}} e^{\frac{S(E)}{k_B}} \quad \Big| \quad = \frac{e^{-\frac{E}{k_B T}} e^{\frac{S(E)T}{k_B T}}}{Z} = \frac{e^{-\frac{E - TS}{k_B T}}}{Z}$$

(F: Szabad energia)

- p,T sokaság: (Nyomás és hő d.) A kis rendszer (Energiája) hőmérséklete és térfogata is változhat

$\Omega + \Omega^* = \Omega^T$

$$P_i = \frac{\Omega^*(E^T - E_i, V^T - V_i)}{\Omega^T(E^T, V^T)}$$

(Keressük, hogy a teljes rendszernek (vagyis a külvilágnak) hány olyan állapota van amiben az i. állapotot veszi fel és P_i: ennek aránya az összes állapothoz képest)

$$P_i = \frac{\Omega^*(E^T - E_i, V^T - V_i)}{\Omega^T(E^T, V^T)} \cdot \frac{\Omega^*(E^T, V^T)}{\Omega^*(E^T, V^T)} = \frac{\Omega^*(E^T, V^T)}{\Omega^T(E^T, V^T)} \cdot e^{\left[\frac{S^*(E^T - E_i, V^T - V_i)}{k_B} - \frac{S^*(E^T, V^T)}{k_B}\right]}$$

$$P_i = \frac{\Omega^*(E^T, V^T)}{\Omega^T(E^T, V^T)} e^{-\frac{E_i + pV_i}{k_B T}} \quad \leftarrow H_i: \text{entalpia}$$

Entalpia: $H_i = E_i + pV_i$

$$\Leftarrow e^{\left[\frac{1}{k_B}\left(-\frac{\partial S^*}{\partial E}E_i - \frac{\partial S^*}{\partial V}V_i\right)\right]}$$

$$\left(\Delta E = T\Delta S - p\Delta V + \sum_i \mu_i \Delta N\right)$$
$$\Delta S = \frac{\Delta E}{T} + \frac{p}{T}\Delta V - \sum_i \frac{\mu_i}{T}\Delta N$$

$$P_i = \frac{e^{-\frac{H_i}{k_B T}}}{\sum_i e^{-\frac{H_i}{k_B T}}} = \frac{e^{-\frac{H_i}{k_B T}}}{Z_{pT}}$$

A pT sokaság állapotösszege: $Z_{pT} = \sum_i e^{-\frac{H_i}{k_B T}}$

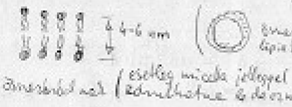
$$P_{(E,V)} = \frac{e^{-\frac{E + pV}{k_B T}}}{Z_{pT}} e^{\frac{S(E,V)T}{k_B T}} \Rightarrow P_{(E,V)} = \frac{e^{-\frac{G}{k_B T}}}{Z_{pT}}$$

A Gibbs féle szabad energia: $G = \ldots - S_{(E,V)}T$

Amfipatikus (amfifil) (mindent szerető: Hidrofil és hidrofób része is van, apoláros és poláros vég)

Membrán (Lipidkettősréteg)

Micella: (belsejében: lehet (?))



poláros vég, apoláros vég

Lipid kettősréteg: 4-6 nm

Liposzóma (membrán): önmagába záródott lipid kettősréteg

A végek vagy önmagukba zárnak (esetleg micella jelleggel rendeződnek a végeken)

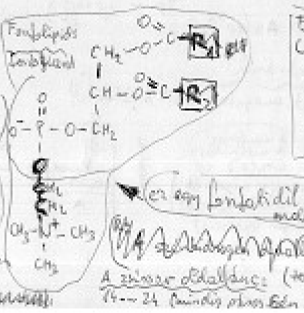
① Foszfolipidek:

pl: foszfogliceridek

(Glicerinek: $CH_2-CH-CH_2$ / OH OH OH)

(Zsírsav: $HO-C(=O)-CH_2-CH_2-\cdots-CH_3$)

Foszfolipidek foszfoglicerid:



Foszfolipid foszfoglicerid: CH_2 – [zsírsav]; CH – [zsírsav]; CH_2 – [foszfát] – [alkohol]

ez egy foszfatidil kolin molekula típus

A zsírsav oldallánc: (telített v. telítetlen) 14…24 (mindig páros) szén atom számú

A telítetlen zsírsavval cisz kötéssel csökkentik a kettősréteget: növeli a folyékonyságot

2

Telítetlen cisz zsírsav oldallánc: (a membrán vastagsága kb 100x-e a cisznek) $Z_{membr} \approx 100\, Z_{cisz}$

- Növeli a folyékonyságot (csökken a vastagsága a membránnak)
- csökkenti az olvadáspontját

② Glikolipidek: cukor molekulától/láncól lógnak le a zsírsav oldallánccal (cukor) cukor rész

③ koleszterin molekula:

pl:

- a lipid membrán olvadáspontját csökkenti
- de a fluiditást is csökkenti

[EA3]

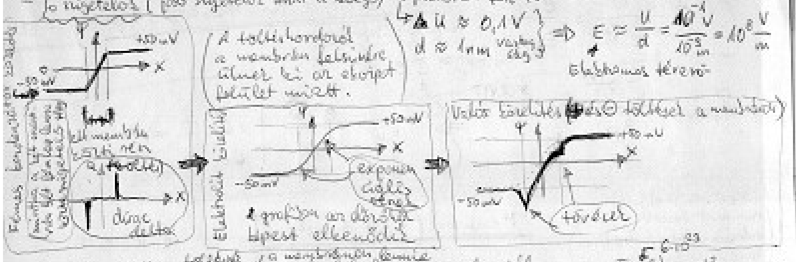
- Lipid molekulák mozgása a membránban
  - Flip flop: két membránréteg közti ugrás ~ órás periódus
  - Vándorlás: $\sim 10^{-12}\ \frac{m^2}{s}$
  - Nyúlás: 1-2% felület változás ($\approx 0{,}6$–$0{,}7\ nm^2$)
  - Jó szigetelők (jobb szigetelő mint a kvarc)

membrán fesz intervallum: $-70 \ldots +40\ mV$

$\Delta U \approx 0{,}1\ V$, $d \approx 1\ nm$ vastagság $\Rightarrow E \approx \frac{U}{d} = \frac{10^{-1}\ V}{10^{-9}\ m} = 10^{8}\ \frac{V}{m}$ elektromos térerő

A töltéshordozók a membrán felszínére ülnek ki az ekvipot. felület miatt.

Valós közelítés (+ és − töltések a membránon)



Kérdés: mekkora töltésnek kell a membránon lennie hogy kialakuljon ez a potenciál

$$C = \frac{Q}{U}$$

Síkkondenzátora:
$$C = \frac{\varepsilon}{d}A \approx 10^{-2}\left[\frac{F}{m^2}\right]\cdot 10^{-10}\ m^2$$

$d \approx 10^{-9}\ m$, $\varepsilon_{membrán} \approx 10^{-11}$

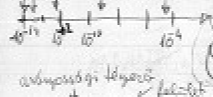
$$Q = CU \approx 10^{-12}[F]\cdot 10^{-1}[V] = 10^{-13}[C]\ (\text{Coulomb}) \approx 10^{6}\ \text{elektron}$$

$$150\left[\frac{mmol}{l}\right](10^{-5})^3 m^3 \approx 10^{11}$$

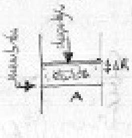
Eukar. sejt átmérője $\approx 10\ \mu m \Rightarrow A \approx (10^{-5})^2\ m^2$

- Fal irodalmak a membránok

(Nemigen engedik át magukon töltött molekulákat)



P: A membrán permeabilitása [m/s] (mennyire engedi át az adott molekulát) (Milyen gyorsan)



$$N = P\, c\, A\, \Delta t = c A \Delta R$$
$$P = \frac{\Delta R}{\Delta t}$$

arányossági tényező

$$J = P\, \Delta c\, A$$

áram, koncentráció különbség, felület

K^+-ra vannak mindig áteresztő csatornák a membránban

C_{K^+}: bent nagy (koncentrációja)
C_{Na^+}: kint nagy — n —

(Na^+: kevés csatorna de nagy konc. különbség)

$\Delta\Psi = \Psi_i - \Psi_o$

K^+ áram

Ha nincs pot. különbség között:

$$\left.\begin{array}{l} {}^+j_{K^+} = C^{in}_{K^+} \cdot P_{K^+} \cdot \alpha^{out}_{K^+}(\Delta\Psi) \\ {}^-j_{K^+} = C^{out}_{K^+} \cdot P_{K^+} \cdot \alpha^{in}_{K^+}(\Delta\Psi) \end{array}\right\}$$

• Stacionárius
Egyensúly beálltakor: ${}^-j_{K^+} = {}^+j_{K^+}$

$$\frac{C^{out}_{K^+}}{C^{in}_{K^+}} = e^{\frac{z_K e \Delta\Psi}{k_B T}} \rightarrow C^{in}_{K^+} = C^{out}_{K^+} e^{-\frac{z_K e \Delta\Psi}{k_B T}}$$

$$j_{K^+} = {}^-j_{K^+} + j_{K^+}$$

(z_{K^+}: K^+ töltésszáma: +1; e: elektron töltése)

$$\frac{\alpha^{in}_{K^+}}{\alpha^{out}_{K^+}} = \frac{C^{out}_{K^+}}{C^{in}_{K^+}} = e^{\frac{z_K e \Delta\Psi}{k_B T}}$$

ez levezetve egyensúlyi állapotból de igaz lesz stacionárius állapotban is

A stacionárius áll. feltétele: $\sum_k j_k z_k e = 0$
A nettó részecskeáramok összege nulla

$$\sum_c j_c - \sum_a j_a = \sum_c ({}^+j_c - {}^-j_c) - \sum_a ({}^+j_a - {}^-j_a) = 0$$

(+ionok) (−ionok)

$$\sum_c C^{out}_c P_c \alpha^{out}_c + \sum_a C^{in}_a P_a \alpha^{in}_a = \sum_c C^{in}_c P_c \alpha^{in}_c + \sum_a C^{out}_a P_a \alpha^{out}_a$$

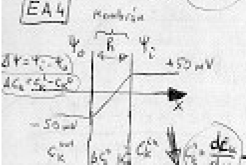
$$\sum_c {}^-j_c + \sum_a {}^+j_a = \sum_c {}^+j_c + \sum_a {}^-j_a$$

$$\alpha^{in}_c e^{\frac{e\Delta\Psi}{k_B T}} \qquad \alpha^{in}_a e^{\frac{e\Delta\Psi}{k_B T}}$$

$$\Downarrow$$

$$\exp\left(\frac{e\Delta\Psi}{k_B T}\right) = \frac{\sum_c C^{in}_c P_c \alpha^{out}_c + \sum_a C^{in}_a P_a \alpha^{in}_a}{\sum_c C^{out}_c P_c \alpha^{out}_c + \sum_a C^{out}_a P_a \alpha^{in}_a}$$

EA4



β_K: K ion partíciós együtthatója
(az ionok a membránban kevésbé szeretnek lenni, mint kívül)
A membrán belsejében β_K arányában csökkentett koncentrációjú lesz a C_K, a membrán kívüli oldalhoz képest

$$C_K' = \frac{dC_K}{dx}$$

Az ion árama:
$$\boxed{j_K = -D_K\left(C_K' + C_K \frac{z_K e}{k_B T}\Psi'\right)} \quad \text{Nernst–Planck egyenlet}$$

Ez az általánosított Fick egyenlet spec. esete, amikor ...

Adiffúziós egyenlet alapján:

$$j = -D\nabla C + \frac{F}{\gamma} C \quad \left| \, F = -\nabla U \right.$$

diffúziós együttható — koncentráció — erő — (U: potenciál)

$$D = \frac{k_B T}{\gamma} \qquad z_K e\Psi' = \frac{\Delta\Psi}{h}$$

$U = \Psi$

$$j_K = -D_K\left(C_K' + C_K \frac{z_K e}{k_B T}\Psi'\right)$$

P_K: k-ik ionra a membrán permeabilitása $\left(P_K = -D_K \frac{\beta_K}{h}\right)$

Spec. eset:
Ha $\Delta\Psi = 0 \Rightarrow j_K = -D_K C_K' = -D_K \frac{\beta_K C_K}{h}$

(ebben az esetben C_K' konstans)

$$C_K' = -\frac{j_K}{D_K} - \frac{z_K e \Delta\Psi}{k_B T h} C_K$$

$$\frac{dC_K}{dx} = -\frac{z_K e \Delta\Psi}{k_B T}\frac{1}{h}\left(C_K + \frac{j_K}{D_K}\frac{k_B T}{z_K e \Delta\Psi} h\right) = -\frac{\varepsilon_K}{h}\left(C_K + \frac{j_K}{D_K}\frac{h}{\varepsilon_K}\right) = \frac{dC_K}{dx}$$

ε_K: konstans

$$\frac{dC_K}{C_K + \frac{j_K}{D_K}\frac{h}{\varepsilon_K}} = -\frac{\varepsilon_K}{h} dx \quad \text{(konstans)}$$

Az integrálást elvégezve:

$$-\frac{\varepsilon_K}{h}[x]_0^h = \left[\ln\left(C_K + \frac{j_K}{D_K}\frac{h}{\varepsilon_K}\right)\right]^{\beta_K C^{in}_K}_{\beta_K C^{out}_K}$$

$$-\varepsilon_K = \left[\ln(\ldots)\right]^{\beta_K C^i_K}_{\beta_K C^o_K} \Rightarrow e^{-\varepsilon_K} = \frac{\beta_K C^i_K + \frac{j_K}{D_K}\frac{h}{\varepsilon_K}}{\beta_K C^o_K + \frac{j_K}{D_K}\frac{h}{\varepsilon_K}}$$

$$e^{-\varepsilon_K}\left(\beta_K C^o_K + \frac{j_K}{D_K}\frac{h}{\varepsilon_K}\right) = \beta_K C^i_K + \frac{j_K}{D_K}\frac{h}{\varepsilon_K} \Rightarrow \beta_K C^i_K - e^{-\varepsilon_K}\beta_K C_K = e^{-\varepsilon_K}\frac{j_K h}{D_K \varepsilon_K} - \frac{j_K h}{D_K \varepsilon_K}$$

$$j_K = \frac{\beta_K C^i_K - e^{-\varepsilon_K}\beta_K C_K}{e^{-\varepsilon_K}\frac{h}{D_K \varepsilon_K} - \frac{h}{D_K \varepsilon_K}} = -P_K \varepsilon_K \left(\frac{C^i_K - C^o_K e^{-\varepsilon_K}}{1 - e^{-\varepsilon_K}}\right)$$

$$P_K = \frac{\beta_K D_K}{h} \qquad C^o_K = C_K \qquad C^i_K = C^o_K$$

Indexek:
c: kationok
a: anionok

$${}^+j_K = P_K C^o_K \alpha^o_K(\Delta\Psi) \quad \Big| \quad \alpha^o_K(\Delta\Psi) = \varepsilon_K \frac{e^{-\varepsilon_K}}{1 - e^{-\varepsilon_K}}$$

$${}^-j_K = P_K C^i_K \alpha^i_K(\Delta\Psi) \quad \Big| \quad \alpha^i_K(\Delta\Psi) = \frac{\varepsilon_K}{1 - e^{-\varepsilon_K}}$$

$$e^{\frac{e\Delta\Psi}{k_B T}} = \frac{\sum_c C^o_c P_c \alpha^o_c + \sum_a C^i_a P_a \alpha^i_a}{\sum_c C^i_c P_c \alpha^o_c + \sum_a C^o_a P_a \alpha^i_a}$$

$$\alpha^o_c = \varepsilon_c \frac{e^{-\varepsilon_c}}{1 - e^{-\varepsilon_c}}$$

$$\alpha^i_a = -\varepsilon_c \frac{1}{1 - e^{\varepsilon_c}} = \varepsilon_c \frac{e^{-\varepsilon_c}}{1 - e^{-\varepsilon_c}} \qquad \alpha^o_c = \alpha^i_a$$

ebben az esetben ezért α-kal egyszerűsíteni lehet és:

$$e^{\frac{e\Delta\Psi}{k_B T}} = \frac{\sum_c C^o_c P_c + \sum_a C^i_a P_a}{\sum_c C^i_c P_c + \sum_a C^o_a P_a}$$

Más: A, A^-, B, B^- különböző molekulák: $\left(\begin{array}{l} A + e^- \rightarrow A^- \\ B + e^- \rightarrow B^- \end{array}\right)$

$$A + B^- \rightleftharpoons A^- + B \quad \text{(Redox reakció)}$$

A Gibbs féle szabadenergia különbség:

$$\Delta G = \underbrace{\mu^o_{A^-} + \mu^o_B - \mu^o_A - \mu^o_{B^-}}_{} + k_B T \ln \frac{[A^-][B]}{[A][B^-]}$$

koncentrációk

ΔG^o: Anyagfüggő értékekből levezethető vagy mérési adatokból megadható ΔG^o

Gibbs potenciál:
$$G = \sum_k N_k \mu_k$$
(Az egy molekulára jutó kémiai potenciál: a μ_k kémiai potenciál)

$$\mu_k = \mu^o_k + k_B T \ln C_k$$

$A + e^- \rightarrow A^-$: Redukció (e^- felvétel)
$A^- \rightarrow A + e^-$: Oxidáció (e^- leadás)

Félreakciókkal:
Tiszta vett (?) :

$$A + e^- \rightleftharpoons A^- : \Delta G_A = \mu^o_{A^-} - \mu^o_A - \mu^o_{e^-} + k_B T \ln\frac{[A^-]}{[A]} - k_B T \ln[e^-]$$

$$B + e^- \rightleftharpoons B^- : \Delta G_B = \mu^o_{B^-} - \mu^o_B - \mu^o_{e^-} + k_B T \ln\frac{[B^-]}{[B]} - k_B T \ln[e^-]$$

De ha a két félreakciót kivonjuk egymásból akkor az eredeti egész reakciót kapjuk vissza és a $(k_B T \ln[e^-])$ tagok és $\mu^o_{e^-}$ tagok kiesnek amik nem voltak valósak

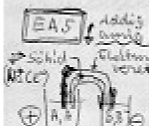
(Emiatt a félreakciók ΔG értékei tetszőleges konstanssal eltolhatók, mert a kivonás után az konstans eltolások kiejtik egymást)

$$\Delta G = \Delta G_A - \Delta G_B = \text{az eredeti teljes reakció}: \mu^o_{A^-} + \mu^o_B - \mu^o_A - \mu^o_{B^-} + k_B T \ln\frac{[A^-][B]}{[A][B^-]}$$

EA5

Addig áramlik az e^- amíg a ΔG nem csökken le nullára

$$\left(\frac{k_B T}{-e} \approx \Big| \begin{array}{l} T = 20°C \\ 25\,mV \end{array}\right)$$



Galván elem (Referencia tartály)

A két tartály pot. különbsége:

$$E^{B^- \to A} = \frac{\Delta G_{B^- \to A}}{-e} = \frac{\Delta G^o_A}{-e} - \frac{\Delta G^o_B}{-e} + \frac{k_B T}{-e}\ln\frac{[A^-]}{[A]} - \frac{k_B T}{-e}\ln\frac{[B^-]}{[B]}$$

e^- töltése

E^A_o $\quad$ E^B_o

Az elem kimenetelése között csak a konc.-arányok változnak

ezeknek alapja ez (Közben kicsit változhatna ez a jövőben a két pólus között fesz.-t)

($E = \Delta G/e^-$)

• Az oldatban protonok is vannak:

$$A + mH^+ + ne^- \rightleftharpoons AH_m^{(n-m)-}$$

$$\Delta G_A = \underbrace{\mu^o_{AH_m^{(n-m)-}} - \mu^o_A - m\mu^o_{H^+} - n\mu^o_{e^-}}_{\Delta G^o_A} + k_B T \ln\frac{[AH_m^{(n-m)-}]}{[A]} - m k_B T \ln[H^+] - n k_B T \ln[e^-]$$

két fél reakció kapcsolatából ez kiesik majd

Redox pot.: a félreakciókra:

$$E_A = \frac{\Delta G_A}{-ne}$$

$$E^o_A = \frac{\Delta G^o_A}{-ne}$$

Vegyész standard: $\Delta G^o = \Delta G$ mindenből: (1 mol/l)-ban

$$\Delta G^{o'}_A = \Delta G^o_A - m k_B T \ln 10^{-7}$$

$$\Rightarrow E^{A'}_o = \frac{\Delta G^{o'}_A}{-ne} = E^A_o + \frac{m}{n}\frac{k_B T}{e}\ln 10^{-7}$$

$$E^{A'}_o = E^A_o - \frac{m}{n} 0{,}42\ \text{Volt}$$

Biokém standard:
$\Delta G^{o'} = \Delta G$ (semleges pH)
$[H^+] = 10^{-7}$ mol/l
minden más (1 mol/l)

Standard elektróda: Hidrogén elektróda amin: 1 mol/l H^+ és 1 atmoszférás $[H_2]$ az elektród felett

Példák konkrét folyamatokkal:

$2H^+ + 2e^- \rightleftharpoons H_2$
$m = 2$, $n = 2$
Standard H^+ elektróda esetén:
$E_o[V] = 0 \longrightarrow E_o'[V] = -0{,}42$
$E_o'[V] = E^A_o - \frac{m}{n} 0{,}42$ $\quad$ $m=2$, $n=2$

	n (e^-)	m (H^+)	E_o'[V]	E_o[V]
$2H^+ + 2e^- \rightleftharpoons H_2$	2	2	−0,42	0
$Fe^{3+} + e^- \rightleftharpoons Fe^{2+}$	1	0	+0,77	+0,77
$NAD^+ + H^+ + 2e^- \rightleftharpoons NADH$	2	1	−0,32	$(-0{,}32 + \frac{1}{2} \cdot 0{,}42) = -0{,}11$
$\frac{1}{2}O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightleftharpoons H_2O$	2	2	+0,82	$(+0{,}82 + 0{,}42)$

E_o: 1,14 V; −0,32; +0,82; E_o'

$$\frac{1}{2}O_2 + NADH + H^+ \rightleftharpoons H_2O + NAD^+$$

Ha minden 1 mol/l kivéve a H^+ ami 10^{-7} m/l $\Rightarrow$ $E_o' = 1{,}14$ V pot.-különbség

$$\Delta G^{o'} = -ne E_o' = -2e \cdot 1{,}14\,V = -2{,}28\ eV \approx -90\,k_B T$$

$$\Delta G = \Delta G^{o'} + m k_B T \ln 10^{-7} + k_B T \ln \frac{[NAD^+]}{[O_2]^{\frac{1}{2}}[NADH][H^+]}$$

Élő szervezetben az e^- útja:

$$NADH \xrightarrow{e^-} \square \xrightarrow{e^-} \square \xrightarrow{e^-} O_2$$

membrán protonpumpák

E

A NADH-ból oxidációval felszabadított energia ~~megfelelő~~ proton pumpálásra adódik át

$ATP \xrightarrow{-20-25\,k_B T} ADP$

EA6 Metabolizmus:

itt több lépésben adódik át az energia (elektron)

(Közben a mitokondrium belsejéből többször több protont pumpálnak és a kialakuló proton gradiens visszaáramlása során a beáramló protonok hajtják az ATP szintézis komplexet)

Oxidatív foszforiláció:

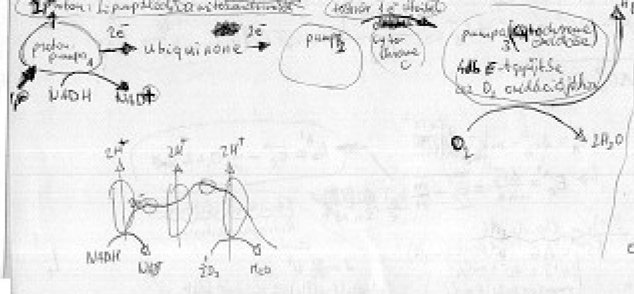
Fehérje → aminosavak ↘
poliszacharid → monoszacharidok → AcetilCoA → Citrát sav kör
Zsírok → zsírsavak ↗

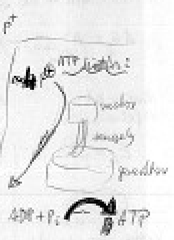
NAD^+ ⇄ $NADH$ $\quad$ ADP → ATP (oxidatív foszforiláció)

1 citromsav ciklus alatt keletkező molekulák: $\left\{\begin{array}{l} 3\,NADH \\ 1\,GTP \\ 1\,FADH_2 \end{array}\right.$

Mitokondrium:

– Külső membrán: Szinte mindent átenged (ELD elektron, átlátszó lesz)
– a belső membrán a valódi gát (azon belül van a mátrix)





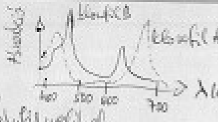
Egy fordulat 3 ATP (12 H^+) átalakulással

Növényel:

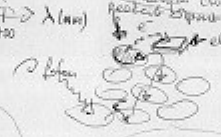
Kloroplasztisz:

Tylakoid membránban – a fényt a klorofil molekulák nyelik el

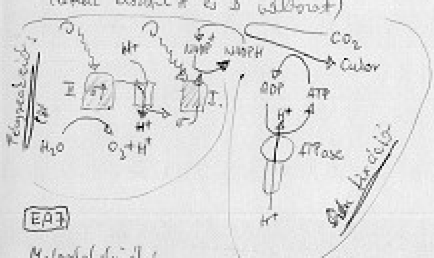
(ebből klorofil A és B változat)

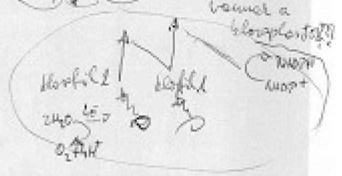


A zöld fényt nem nyelik el (?)



A komplex több egyre sűrűbben vannak a kloroplasztisz(?)





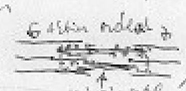
$k_BT \approx 4\,pN\,nm$

EA7

Motorfehérjék:

- ATP szintetáz
- Bakteriális flagellum motorfehérje komplexe
- mikrotubulusokon mozgó motorfehérjék (pl: kinezinek)
- mikrofilamentumon — " — (pl. aktin filamentumokon: miozin)
- intermedier filamentum

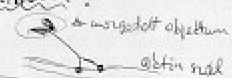
Izom összehúzódás:



- ATP hidrolízisből kap energiát a konform változásban ...
- majd leesik róla az ADP → lefűzi az aktin szálat és a miozin ...
- és új ATP-t köt amikor ... aktinszálat ... más pozícióban)

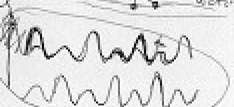
* Miozin V.: (duplalábú miozin) egy lépéssel aktin aktinszálon lép

* Kinezin:

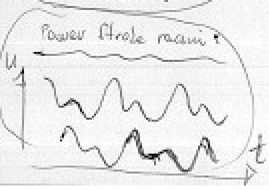


diffúzió: $t \approx \frac{l^2}{D}$ | $D \approx 10^{-10}\, m^2/s$

motorfehérje: $t \approx \frac{l}{v}$ | $v \approx 10^{-6}\, m/s$



Power stroke modell:



EA8

... power-stroke modell | → Maxwell-démon ... a molekulán

folytonos energiát ... a molekulába

2011. 11. 0? EA8/1

Mechanokémiai csatolás → molekuláris motorok

... a kinetikai állapotok ...

$A \rightleftharpoons B$, $D \rightleftharpoons C$ — kinetikai állapotok közötti átmenet

... az A-B állapotok közti átmenetek ... a legtöbb ... B-be ... energiája

$p_A k_{AB} = p_B k_{BA}$

$$\frac{p_B}{p_A} = \frac{k_{AB}}{k_{BA}} = e^{-\frac{G_B - G_A}{kT}} = \frac{e^{-\frac{G_B}{kT}}}{e^{-\frac{G_A}{kT}}}$$

a G-k ... szabadenergiák

Tekintsük az ABCD körfolyamatot:

$$\frac{k_{AB}}{k_{BA}} \cdot \frac{k_{BC}}{k_{CB}} \cdot \frac{k_{CD}}{k_{DC}} \cdot \frac{k_{DA}}{k_{AD}} = \frac{e^{-\frac{G_B}{kT}}}{e^{-\frac{G_A}{kT}}} \cdot \ldots = 1$$

$$\frac{\prod_{cikl} k_f}{\prod_{cikl} k_b} = 1$$

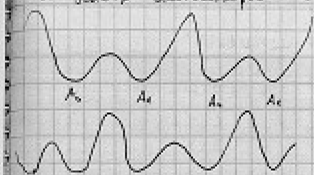
H- ... (molekuláris motor)

a ... a H^+ ... forgatják

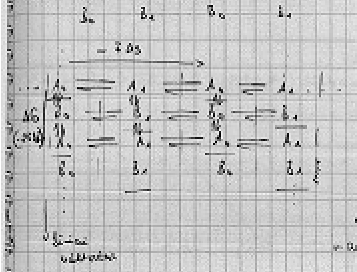
... a H^+ ... Maxwell-démon

a ... szabadentalpia a H^+ ionok mozgása biztosítja

EA8/2



... power-stroke ... ugrás ... modell



← ATP kötődés → ... ← ... H^+ ...

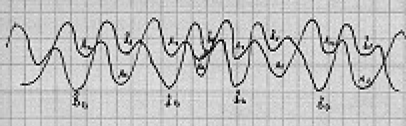
mechanokémiai csatolás → nagy ... csatolás ... nagy energiagáttal ...

$\Delta G - F\Delta s = 0$

$$F = \frac{\Delta G}{\Delta s}$$

... a kinetikai ... a ...

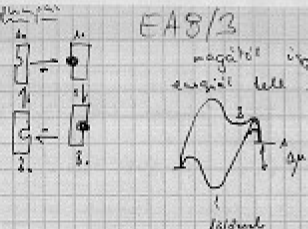
Power-stroke modell



... ATP hidrolízis ...

komplementer

EA8/3



magától így nem működhet
energiát kell befektetni → ATP

hasonlóan működik, mint az előző modell → két különböző fajta van összemérhető

Δμ → egyensúlyi modellt alkalmaz

ΔG

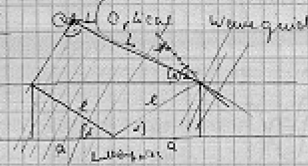
ATP generálás

addig halad például, amíg $|\Delta\mu| < |\Delta G|$

2011. 11. 21.

Egy előadás kimaradt.

OWLS (Optical Waveguide Lightmode Spectroscopy)



nem akármilyen szögben terjedhetnek módusok az optikai szálban is ez történik
ha az optikai módusok rétegét építi, ezekből módusok terjedhetnek a fény

$$L = 2a\cos\alpha = 2h\frac{\cos^2\alpha}{\sin\alpha}$$

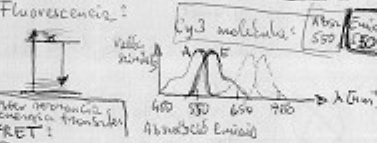
$$h\frac{\cos\alpha}{\sin\alpha}$$

$$l = \frac{h}{\sin\alpha}$$

$$2l = L + k\lambda \quad \text{módus}$$

EA9 Rezonancia energiatranszfer

Fluoreszcencia:

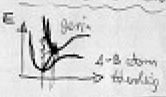


Cy3 molekula: Absz. 550 | Emisszió 530 | max 570 … 650

Cy5 Absz.: 550 (650) 670
Emissziós max: 670 nm

Cy3 és Cy5 ilyen

Franck Condon elv:



Foszforeszcencia: tiltott átmenet
gerj.
alap

FRET:

Ha az 1. emissziós spektruma átfed a 2. abszorpciós spektrumával

rezonanciában van a két molekula:
akkor csatolódnak
és a két molekula közel van (pár nm távol)

Ekkor foton kibocsátás nélkül közvetlenül adódik át az energia (ami jóval gyorsabb is, mint a fotonnal)

A sebességi állandója: $k_{FRET} \sim \frac{1}{R^6}$ (R: távolsága a két molekulának)

Hatásfoka:

$$E_{FRET} = \frac{1/R^6}{(1/R^6) + (1/R_0^6)} = \frac{R_0^6}{R_0^6 + R^6}$$

R_0: állandó nm (2–6 nm)

kb ezen a távon belül jó a fret hatásfoka

$R_0 \approx 2$–6 nm ⇒ kb 10 nm-ig

használható a FRET molekula konformációváltozás mérésére
(egyúttal hogy a két molekula pozícióra helyezett rezonáns molekulaként pozícióváltozásának detektálására)

FRET a fotoszintetikus rendszeren:

Az antenna rendszeren történő energia transfer

Lehetséges energia átadási módok:
① Hő, fény segítségével: →
② FRET
③ A reakció központban: e⁻ transzfer folyamat … → D A → D A → D A → …
donor acceptor

•: e⁻-t jelöl

szőlőcukor égetése oxidatív konformáció (→ 2 + 30 ATP keletkezik)

$$C_6H_{12}O_6 + 6O_2 \rightleftharpoons 6H_2O + 6CO_2$$

fotoszintézis 48 db foton kell (60 kcal) 48 · 70 kT ≈ 3400 kT

∼1200 kT ⇒ 50–60 ATP keletkezéséhez lenne elég, de csak kb 32 ATP keletkezik
↳ ≈ 60% hatásfok

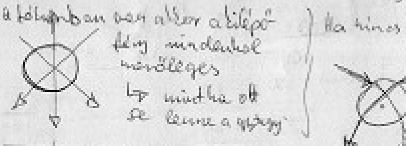
A fotoszintézis hatásfoka ≈ 30% lenne ha 700 nm-es fotonokat használna energiájával, kisebb a hatásfok mert csoportosítanak

Optikai csipesz:

jól fókuszált lézerrel a fókuszában tartunk egy gyöngyszemet.

Ha a fókuszban van akkor a kilépő fény mindenhol merőleges
↳ mintha ott se lenne a gyöngy

Ha nincs a fókuszban akkor fénytörés lesz.



a foton impulzusa megváltozik a fénytöréstől
↳ a gyöngytől ered ez
↳ ami a gyöngyöt húzza a fókusz felé vissza

(a gyöngy feltétel mozdul, mert a foton impulzust kap)

Fontos hogy a gyöngy ne nyelje el fotont (át kell tudnia teljesen engedni)

A kifejtett erő:

$$\underline{F} = m\underline{a} = m\dot{\underline{v}} = \dot{\underline{p}} = \frac{dp}{dt} \Rightarrow$$

$$\underline{F} = \alpha\frac{dp}{dt} = \frac{\alpha}{c}\frac{dE}{dt} = \frac{\alpha}{c}P \simeq \alpha\frac{10\,mW}{3\cdot10^8\,\frac{m}{s}} \approx \alpha\cdot 33\,pN$$

teljesítmény

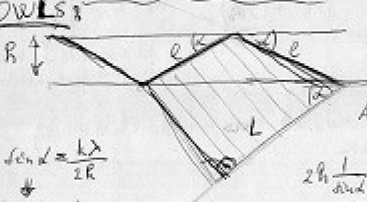
→ Tehát néhány pN erő vihető át lézer-csipesszel (10 mW teljesítmény)

a fotont hányad részét veszti el a belépési impulzusának

(Nagyobb fény lézer károsíthatja a bio anyagot)

EA10 fény terjedése lemezben:

OWLS:



$$L = 2a\cos\alpha = 2h\frac{\cos^2\alpha}{\sin\alpha}$$

$$l = \frac{h}{\sin\alpha}$$

Akkor tud terjedni egy módus, ha: $2l = L + k\lambda$

$$2h\frac{1}{\sin\alpha} = 2h\frac{\cos^2\alpha}{\sin\alpha} + k\lambda$$

$$2h = 2h(1-\sin^2\alpha) + k\lambda\, 2\sin\alpha \Rightarrow 2h\sin^2\alpha = k\lambda\sin\alpha$$

$$\sin\alpha = \frac{k\lambda}{2h}$$

$\sin\alpha = \frac{k\lambda}{2h}$

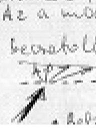
① ha $h < \frac{\lambda}{2}$ akkor egy terjedő módus sincs

② Ha vastagítjuk a lemezt, akkor egyre több módus tud terjedni benne

③ Makroszkópikus vastagságú lemezben már…

Alkalmazása: (0,1 ng/cm² kitapadás detektálható??? ⇒ $10^{13}\,\frac{1}{cm^2}$)

- vékony mérőlemez felületére kitapadt pl. fehérjék vizsgálatára: mert olyan mintha kicsit vastagodna a lemez → α változást okoz
- Becsatolás: Az a módus ami tud benne terjedni azzal a szöggel lehet becsatolni
- A becsatolás helyén optikai rács



ami több irányos szögekre felbontva lép tovább a fény a lemez belsejében

SPR: Felületi plazmon (polariton) rezonancia

fény → fém

olyan mint az OWLS, csak itt fém borításra való kitapadást detektáljuk ami elektron és foton gerjentés rezonanciát okoz…???

Csak 1 irányos szögben beeső foton gerjeszti a felületen levő plazmon polaritont amit a felületre kitapadó molekulák befolyásolnak.

QCM: kvarc kristály mikrobalanc mérleg:

Piezo lapka rezegtetése folyadékban úgy, hogy hangot ne keltsen (csak úgy rezegjen) nyírási módusban) (transzverzális hullám folyadékban nem terjed tovább)

(Csak a felület közvetlen közelében rezegteti a folyadékot a viszkozitásnak megfelelően)

Ha kitapadt a felülethez valami molekula az növeli az energia disszipációját (ezzel a felületére tapadtakat)

$f = 4$–6 MHz, ∼250 nm-en belül terjed a rezgés víz esetében

η: viszkozitás
ρ: sűrűség
f: frekvencia

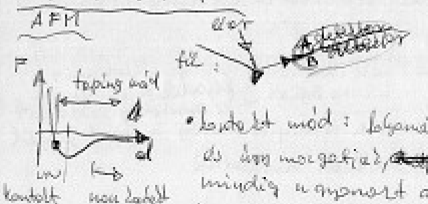
$$\sqrt{\frac{2/\rho}{f}}\ \text{dimenziója: [m]} \rightarrow l\ (\text{távolság})$$

(R (Reynold szám) $= \frac{\rho v a}{2}$)

$$\Rightarrow = \sqrt{\frac{10^3/10^3}{5\cdot10^6}} = \frac{1}{15}\cdot 10^{-6}\,m \approx 250\,nm$$

Atomerő mikroszkópia:

AFM



A és B detektorokba milyen arányban jutott a fény (a tű helyzetétől függ)

- kontakt mód: folyamatos nyomódik a tű és úgy mozgatjuk, a mintát, hogy a tű mindig ugyanazt az erőt érezze (a tű követi a felületet)
  (Akkor van adott erőn a tű ha a detektor pont azt detektálja, hogy a tű adott pontban van A és B detektor balanced)
  – A felület pedig piezo-kerámia helyezte amivel szabályozzák a helyzetet
- Taping mód: belecsapkodunk időnként az anyagba a tűvel
- Non kontakt mód: nem ér a tű a felülethez; csak a van der Waals erőket érzi

Elektroforézis:

– Elektroforézis (elektromos erőtér)
– Szedimentáció (gravitációs / centrifuga)

- Fehérje + SDS (nátrium dodecil-szulfát)
  (denaturálja a fehérjét és felfog töltést: $1e^-$/2 aminosav körül)
- DNS/RNS (nem kell SDS, mert) $\approx 1e^-$/foszfát töltésük van.

Szedimentáció:

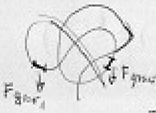
L_k: Kuhn távolság: a feltekeredés mértékére jellemző, hogy a tekergés pálcát eldobja
(minél hajlékonyabb, annál kisebb az L_k értéke)

Az egyes Kuhn szegmenseket véletlen szögben álló csuklókkal kötjük össze.
↳ Számítható a gombolyag várható méretének négyzete.
(bolyongási probléma mint a diffúzió terjedése az időben)

$$\sigma^2 = \underbrace{\frac{L}{L_k}}_{\text{egymás utáni lépések}} L_k^2 = L L_k \rightarrow \sigma = \sqrt{L L_k}$$

Eredmény: A gombolyag mérete

Csak a gombolyag felülete súrlódik a vízzel (mert a belsejében levő vizet magával viszi)



Az az erő amely a polimerrel szemben hat, az abban levő vízre is hat

Navier-Stokes: $\rho \frac{du}{dt} = -\nabla p + \eta \nabla^2 u + f$ (u: sebesség)

Túlcsillapított esetben a gyorsulási tag elhanyagolható

$F_{gr,1}$ $F_{gr,k}$

A folyadék az erővonalak helyén lesz a legnagyobb

$$u \sim \frac{F_1}{|r - r_1|\eta} : \frac{[kg\frac{m}{s^2}]}{[m][\frac{kg}{ms}]} = \left[\frac{m}{s}\right]$$

A folyadék sebessége a húzó erőtől a távolság reciprokával lesz arányos (vízben).

A sebessége a gombolyag közepében:

$$u_{közepén} > \frac{1}{\sigma} L = \sqrt{\frac{L}{L_k}} \xrightarrow{L \to \infty} \infty$$

: Ez értelmetlen mert ellentmond a hűtésnek } de csak addig gyorsítja a folyadékot amíg a ~~folyadék~~ el nem éri a gombolyag sebességét

Tehát a benti víz nagy L esetén is együtt mozog a gombolyaggal

Csak a ~~felszínnel~~ a külső ~~folyadékkal~~ súrlódni

~~Szedimentáció~~ Elektroforézisnél, viszont nem viszi magával a ~~belsejében~~ levő folyadékot ~~...~~ ellentöltés miatt

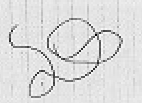
$\boxed{\text{EA11}}$

Hiányzik.

Elektroforézis $\boxed{\text{EA11/A}}$

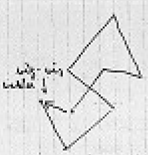
fehérje + SDS: denaturálás + feltöltődés $\quad -\frac{1e}{2 \text{ aminosav}}$

DNS, RNS: $-1e$/bázis

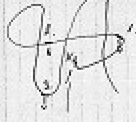


kering a folyadékban, gombolyagot alakít L

L_k Kuhn távolság → ...



$$\sigma^2 = \frac{L}{L_k} \cdot L_k^2 = LL_k \qquad \sigma \sqrt{LL_k}$$



$$\rho \frac{du}{dt} = -\nabla p + \eta \nabla^2 u + f \qquad \text{Navier - Stokes}$$

$$u \sim \frac{F_1}{|r - r_1|\eta} : \frac{[kg \frac{m}{s^2}]}{[m][\frac{kg}{ms}]}$$

folyadék sebessége

$$u_k \sim \frac{1}{\sigma} L = \sqrt{\frac{L}{L_k}} \xrightarrow{L \to \infty} \infty$$

a gombolyag közepén

Elektroforézisnél ... nem viszi magával a polimer a folyadékot

2011. 11. 28.

QCM-ben

$$\nabla u = 0 \quad \text{összenyomhatatlan} \qquad u = \begin{pmatrix} u(z) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\rho \frac{du}{dt} = -\nabla p + \eta \Delta u + f$$

$$x: \rho\left(\frac{\partial u(z)}{\partial t} + \frac{\partial u(z)}{\partial z} \cdot \underbrace{\frac{\partial z}{\partial t}}_{u_z = 0}\right) = \eta \frac{\partial^2 u(z)}{\partial z^2} \qquad x \text{ irány}$$

a többi komponens 0

EA11/B

$$\dot u = \frac{\eta}{\rho} u''$$

a sebesség diffúzióként terjed a folyadékban.

$$u = u_0 e^{i\omega t} e^{\pm\sqrt{i\omega\frac{\rho}{\eta}}z}$$

$$\sqrt{i} = \frac{1+i}{\sqrt{2}}$$

$$u = u_0 e^{i\omega t} e^{-i\sqrt{\frac{\omega\rho}{2\eta}}z} e^{-\sqrt{\frac{\omega\rho}{2\eta}}z}$$

$$z_0 = \sqrt{\frac{2\eta}{\omega\rho}} : \text{behatolási mélység}$$

$$= \sqrt{\frac{2\eta}{2\pi\nu\rho}} = \sqrt{\frac{\eta}{\pi\nu\rho}} = \sqrt{\frac{10^{-3}}{5 \cdot 10^{6} \cdot 10^{3}}} \sim 10^{-6} \frac{1}{\sqrt{15}} \sim 250 \text{ nm}$$

Elektroforézis folyt.

$$F_{szed} = m^* a_{szed} \sim L$$

$m^* = \left(1 - \frac{\rho_{víz}}{\rho_{pol}}\right) \cdot m_{pol}$

$$F_{súrl} = 6\pi\eta R\, v \sim \sqrt{L}\, v \qquad R \sim \sqrt{LL_k}$$

$$L \sim \sqrt{L}\, v \qquad v \sim \sqrt{L}$$

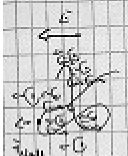
elektroforézis

$$F_{el} = qE \sim L$$

$$F_{súrl} \approx qL\, v \sim L v$$

$L \sim Lv$, $v \sim L^0$ független L-től

DNS-t vagy RNS-t folyadékban nem tudunk hossz szerint szeparálni megoldás: gélbe kell tenni → akkor a kis részek a gél közegében, így függ fgy a hossztól → a kisebb szálak haladnak a rövidek menjenek gyorsan



gyorsan vis a szál hossz

mellé nézni kell megállítani a szál megásait?

$f_{\text{súrl}} + q\underline{E} = 0$

$f_{\text{súrl}} = -q\underline{E}$ ... teljesen rossz, 80-a ... között

$v = 0$ megállt a polimerrészek

$$v = \frac{f_{\text{súrl}}}{\gamma} = \frac{qE}{\gamma_{\text{eff}}}$$

súrlódási együttható

$$f_{\text{súrl}} = -qE\frac{\gamma}{\gamma_{\text{eff}}} \approx -qE\frac{\gamma\ell}{\gamma L} = -qE\frac{\ell}{L} = -qE\sqrt{\frac{L_k}{L}}$$

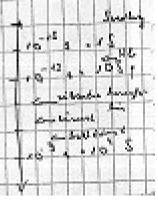
... a folyadékot ... megy, ... a ... a folyadékot így ... a ... és a ... között ... nagy

a gélbe alig deformálja a polimert

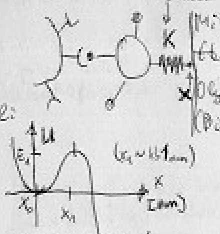
$\underbrace{m_{\text{poli}}\left(1-\frac{\rho_{\text{fa}}}{\rho_{\text{pol}}}\right)}_{\text{redukált tömeg}} a_{\text{cent}}$

$$v = \frac{f_{\text{cent}}}{\gamma} = \frac{m_{\text{pol}}\left(1-\frac{\rho_{\text{fa}}}{\rho_{\text{pol}}}\right)a_{\text{cent}}}{\gamma}$$

szedimentációs együttható: $s = \frac{v}{a_{\text{cent}}} = \frac{m_{\text{pol}}\left(1-\frac{\rho_{\text{fa}}}{\rho_{\text{pol}}}\right)}{\gamma}$



EA 12 Molekuláris erő spektroszkópia



rugóállandó

Milyen energiafelvétel ... a ligandum a receptorból való eltávolítás hatására

Olyan állapotokat ... meg ami ... energia

(Dinamikai vizsgálat)

A rugó merevsége olyan, hogy a kötött ligand mozgását ne legyen korrekt mérni nanométeres

„4 rugó”

pl: – optikai csipesz
– liposzóma (membrán ...)
– kémiai polimer

$(x_1 \sim 1\text{nm})$

energiagát átvitele

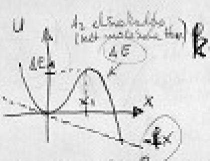
$f = KX$ | K: rugóállandó; nyugalomban: $X=0$; húzás hatására: X

f (húzóerő) ~ arányos a rugó megnyúlással

Adott sebességű húzásnál

$X = vt$: Nézzük mikor szakad el a receptor a ligandumtól → X → f

$f = KX \rightarrow f = Kvt = rt$ | $r = Kv$: terhelési ráta



Az elszakadás (két molekula között) ΔE

a rugóban tárolt energia

$$k = \nu_0 e^{-\frac{\Delta E}{k_BT}} = \nu_0 e^{-\frac{\Delta E_1 - fx_1}{k_BT}} = k_0 e^{\frac{fx_1}{k_BT}} = k_0 e^{\frac{x_1 r t}{k_BT}} = k_0 e^{t/t_1}$$

$$t_1 = \frac{k_BT}{x_1 r}$$

$$\tau = \frac{1}{k} \quad \Big| \quad k = k_0 e^{t/t_1} \quad \Big| \quad t_1 = \frac{k_BT}{x_1 r}$$

$$\tau = \frac{1}{k} = \tau_0 e^{-t/t_1}$$

(A spontán elszakadás időpontja (kötésvállás) $fx_1 = 0$ esete)

t^*: A várható elszakadás időpontja

Elszakadás feltétele: $\tau \approx t_1$ $\quad \tau_0 e^{-t/t_1} = \frac{k_BT}{x_1 r}$

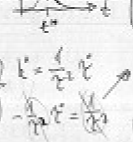
$$t^* = t_1 \ln \frac{x_1 r \tau_0}{k_BT}$$

$$f^* = r t^* = \frac{k_BT}{x_1}\ln\left(\frac{x_1\tau_0}{k_BT}r\right)$$

P: (A kötött állapot valószínűsége / annak valószínűsége hogy nem szakadt el)

$\dot{P}_{(t)} = -k_{(t)}P_{(t)}$ $\qquad Q_{(t)} = 1 - P_{(t)}$ | Q: az elszakadt állapot valószínűsége

$$\left(P_{(t)} = e^{-\int_0^t k(t')\,dt'}\right)$$



Az inflexiós pont az ahol a legnagyobb valószínűséggel történik az elszakadás

$\left(g_{(t)} \equiv \dot{Q}_{(t)}\right.$ az elszakadás valószínűsége$\left.\right)$

$$g_{(t)} = \dot{Q}_{(t)} = -\dot{P}_{(t)} = k_{(t)}P_{(t)}$$

ha $\dot{g}_{(t)} = 0$

$\dot{k}P + k\dot{P} = 0$

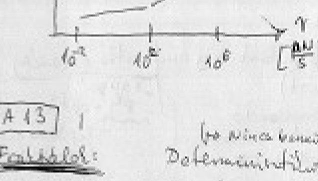
$\dot{k}P = k^2 P \rightarrow \dot{k} = k^2$

$k = \frac{1}{\tau} \rightarrow \dot{k} = \frac{1}{\tau^2}\dot{\tau}$

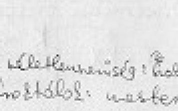
$-\frac{1}{\tau^2}\dot{\tau} = \frac{1}{\tau^2}$

Ott szakad el a legtöbb ahol $\dot{\tau} = -1$ $\quad \left(\tau_0 e^{-t/t_1}\cdot -\frac{1}{t_1} = -1\right)$

$\boxed{\tau = t_1 \text{ az elszakadáskor}}$



Az Energiagát helye az adott szakasz merevségétől függ az adott szakaszon



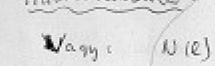
Ezzel a módszerrel a belső energiagát-állapotokat láthatjuk

EA 13 | 1

Fraktálok:

(→ Nincs benne véletlenszerűség: tökéletesen generálható)

Determinisztikus fraktálok: mesterségesen előállított fraktál



Élhossz → ∞
Terület → 0

1 és 2 dim között van

Most a befoglalási ....
3× növelve a méretet (élhosszt)
5× nő a területe

Fraktál dimenzió: $N(L) = L^D$

vagy: $N(\ell) = \left(\frac{1}{\ell}\right)^D$

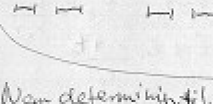
Adatsorok száma: $N \sim \left(\frac{L}{\ell}\right)^D$

$5 = \left(\frac{1}{1/3}\right)^D \rightarrow D = \frac{\log 5}{\log 3}$ $\qquad D = \frac{\log N}{\log \ell}$

D: fraktál dim.
N: fraktál tömege
L: ...
ℓ: ha méretét ...

$N = 5$

pl: Kantor halmaz: 0 és 1 dim közötti dj



$N = 2$
$\ell = 3$
$D = \frac{\log 2}{\log 3}$

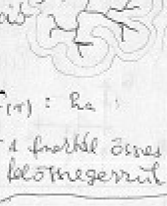
pl:

$N = 4$
$\ell = 3$
$D = \frac{\log 4}{\log 3}$

• Nem determinisztikus fraktál

~~pl: diffúzió aggregált~~

DLA: diffúzió limitált aggregáció



alacsony koncentrációjú környezet

$D = 3$, $\ell^D = N$, $10^3 = 1000$, $\log 1000 = 3$, $\log_\ell N = D$, $\frac{\log N}{\log \ell}$

$D_{DLA} \approx 1{,}715$

Autokorrelációs fg:

$C_{(r)}$: ha

$$C_{(\underline{r})} = \frac{1}{N}\sum_{\underline{r}'}\rho(\underline{r}+\underline{r}')\rho(\underline{r}')$$

A fraktál összes pontjában középérték

ρ: 0 vagy 1 értéket vehet

a ponton akkor

1 ha $\underline{r}'$ is a fraktálon van
0 ha bármelyik vagy $\underline{r}'$ nem a fraktálon van

N: a fraktál pontjainak száma $\left(N = \sum_{\underline{r}'}\rho(\underline{r}')\right)$

Fraktál dimenzió meghatározása a korrelációs fg-el:

• Önhasonló objektum (ilyen a fraktál is más-más léptékekben):
$C_{(\underline{r})} = C_{(r)}$ skálafüggetlen objektum

• $C(br) = b^{-\alpha}C(r) \rightarrow$ Egy ilyen fg adódik: $\boxed{C_{(r)} \sim r^{-\alpha}}$ hatvány fg

b: skála méret változás szorzója

d: beágyazási tér dim

• $N(L) = \sum_r C_{(r)} \rightarrow N(L) = \int_0^L C_{(r)}\,d^d r \sim L^{-\alpha+d} \rightarrow \boxed{D = d - \alpha}$

α: 2dim objektumra $= 0$

DLA-t képző folyamatok:
(Diffúzió limitált aggregáció)

• DLA képződés feltételei:

① $\dot{C} = D\underline{\nabla}^2 C$ → ki tudjuk alakítani egy időfüggetlen koncentrációt ...

$\dot{C} \approx 0$ (közel zéró) Lassan növekedő telep

② A felület normális irányú növekedési sebessége:

$v_n = V_0\,\underline{n}\,D\underline{\nabla}C$

v_n: a felületre merőleges növekedési sebesség

V_0: egységnyi növekedő anyag térfogat egysége

$\underline{n}$: a felületre merőleges egységvektor

A fraktál felszínén az anyagáram felületre merőleges komponense növekszik

③ Határfeltételek:

ⓐ $C(\infty) = C_\infty$ (konstans)

ⓑ $C_r = \sigma K$ $\quad$ A görbült felületek növekedési sebességével ... lassabban nő a felület (mert ... mintha ... lenne a koncentráció)

$C_r = \sigma K = C_\infty d_0 K$ → ha ennél jóval kisebb a görbület, akkor nem számít

molekuláris méret skála

• Viszkózus ujjasodás:

- Két üveg lap között ~~két üveglap~~ viszkózus folyadék van
- az egyik üveglapra lyukat fúrunk azon át befújunk
- gyors befújás során légbuborék DLA szerű mintázatot alkot

• a viszkózus folyadék dinamikája lassú
• a befújt levegő buborékban a nyomás gyorsan kiegyenlítődik

① $\cancel{\rho \frac{d\underline{u}}{dt}} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \underline{u}$, $0 = \nabla \underline{u}$ $\Rightarrow 0 = -\nabla^2 p \rightarrow \Delta p = 0$

itt a nyomás (p) megfelel az előző oldal (C) koncentrációjának

végig ott koncentráció grad által alkotott felületek jöttek létre, itt ⇒ nyomás grad által alkotott felületek

② $v_n \sim -\underline{n}\nabla p$

belső (P_0) azonos nyomás, $\underline{n}$

felület közelében nyomáskülönbség van (normál irányban változik)

③ Határfeltételek:

(P_0: a levegőbuborékban levő nyomás)

Ⓐ $p(\infty) = P_\infty$: konstans (légköri nyomás)

Ⓑ $P_0 = P_\Gamma + \sigma K$ ← a felületen levő folyadék nyomása

a görbületből adódó nyomás

~~levegő~~ a buborékban levő levegő nyomása

$\underbrace{P_0 - P_\Gamma}_{} = \sigma K$

↳ DLA esetén levő C_Γ itt $P_0 - P_\Gamma$-val egyezik

Így alapban ez két Determinisztikus egyenlet viszkózus ujj és DLA esetén is

↳ ~~teljes~~ egyenletes növekedés adódna

de ez instabil megoldás

ami perturbációk hozzáadásával alakítják

a sztochasztikus véletlenszerűséget tartalmazó képet

A baktériumtelepek képesek DLA szerűen növekedni ha korlátozott tápanyag van