

BME-Biofizika vizsgatematika

A – csoport vizsgáztató: Prof. Fidy Judit

1. A biológiai makromolekulák szerkezeti elemei, tipikus méretek, stabilizáló kölcsönhatások.

- Biológia makromolekulák: Az élő rendszerek diverzitását (változatosságát) biztosító változatos típusú, láncszerű molekulák: Atomok → Molekulák → Makromolekulák. Méret: szabad szemmel nem láthatók, erős felbontású mikroszkóp szükséges
- A makromolekulák mind monomer építőegységekből keletkeznek.
- Nukleinsavak, a fehérjék és a poliszacharidok.
 - **Fehérjék:** peptidkötéssel csatlakozó aminosavak hosszú lánc adja a lineáris vagy elsődleges szerkezetet, az aminosav-sorrend határozza meg az adott fehérjét. Néhány ezer aminosavból is állhat, elképesztő változatosságot biztosítva. Másodlagos szerkezet: α -hélix (spirálisan felcsavarodott (jobbmenetű) alak, melynek vázát hidrogénkötések tartják össze) és a β -redőzet (parallel vagy antiparallel módon futó szálaból áll, közöttük H-kötésekkel). Harmadlagos: egy aminosavláncban belül a szabályos és szabálytalan szakaszok egymáshoz viszonyított térbeli elrendeződéséből adódó térszerkezet, melyet kovalens diszulfid (S–S) kötések rögzítenek. Negyedleges: több alegységből, azaz több önálló polipeptidláncból felépülő fehérjéknél az egyes alegységek egymáshoz viszonyított térbeli elrendeződése – köztük gyenge és H-kötésekkel (hemoglobin). A fehérjék alkotta enzimek biológiai katalizátorok: az élő rendszer szinte összes kémiai reakcióját mediálják úgy, hogy szobahőmérsékleten is jó hatásfokkal lezajló reakciókat eredményeznek.
- A sejt különleges makromolekulákat tartalmaz -(fehérjék, nukleinsavak, szénhidrátok, lipidek) -a makromolekulák egyszerű alegységek kombinatoriális egymáshoz kapcsolódásával keletkeznek. -a makromolekulák információt kódolnak (különböző "nyelven"). Sejtben nagy a tömegük.
- A sejtek molekuláris felépítése hierarchikus
- Makromolekuláknak nevezzük azokat a molekulákat, amelyek molekulatömege meghaladja az ezer Daltont
 - Makromolekulák felületi töltései kölcsönhatnak víz-molekulákkal.
 - Molekula – molekula kölcsönhatáshoz a kötött vízmolekulákat le kell választani. A kötött víz-molekulák helyettesítése nagy energia-befektetést igényel. Rövid távú kh. rhidr ~ 0.1 rel.sztat

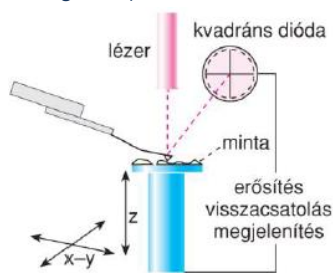
2. A makromolekuláris szerkezet vizsgálati módszerei: AFM és fluoreszcens mikroszkópia, felbontásuk. Szerkezeti adatok elérése, adatbankok.

- Az igazi áttörést és a főleg, de nem kizárólag felszíni struktúrák természetes körülmények közötti atomi, sőt szubatomi szintű láthatóvá tételét az atomerőmikroszkóp (atomerő-mikroszkópia, AFM)

Megjegyzés [D.Ch1]: szerkezeti elemek: - elsődleges szerkezet: atomok, molekulák (fehérjénél aminosavsorrend) - másodlagos szerkezeti elemek: α -hélix, β -redő, stb. - harmadlagos -, -: a teljes polipeptidlánc konformációja, azaz a különböző másodlagos struktúrák egymáshoz való viszonyát nevezzük. - negyedleges: A fehérje negyedleges szerkezetét a különböző polipeptidlánccok egymáshoz viszonyított helyzete, térbeli elrendeződése jelenti. tipikus méretek (ez hiányzik a jegyzetből): - makromolekulák mérete az atomok számának gyökével arányos: $R = \text{konstans} \cdot \sqrt[3]{N}$, ahol N a részecskék száma - az atomok átmérője 10pm-100pm stabilizáló kölcsönhatások: - Coulomb-kölcsönhatás - dipól kölcsönhatások - diszperziós kölcsönhatások (Van der Waals) - kovalens kötések - hidrogén-hidas szerkezetek - hidrofób kölcsönhatás! - entrópia

feltalálása és szinte azonnali megépítése jelentette. Az AFM minden fajta anyag, köztük elektromosan nem vezető anyagok vizsgálatára is kiválóan alkalmazható, szemben az első ilyen jellegű módszerrel, az itt részletesen nem tárgyalt pásztázó alagúteffektusos (STM) mikroszkópiával, amely főleg vezető anyagok vizsgálatára alkalmas.

- **ELVE:** egy közel atomi méretre kihegyezett tűt mozgatunk pásztázó- transzducerek segítségével atomok, molekulák vagy nagyobb objektumok felett a felszíntől igen kis távolságra, és a tű felfüggesztése olyan, hogy az atomokat nem tudja egymástól elszakítani, mert ahhoz gyenge a felfüggesztés rugóállandója, mennyiben képes a tű mozgása a felszíni – atomi vagy molekuláris méretű – topográfiai viszonyokat tükrözni.
- a **Pauli-féle** kizárási elv miatt a tű és a vizsgált anyag elektronfelhőinek a taszítóereje az, ami a gyenge rugóállandó mellett nem engedi, hogy a tű behatoljon az anyagba. Ugyanakkor a sztanol rugóállandója elég erős ahhoz, hogy a tűt (néhány nm, **angström átmérőjű „félgömb, anyaga** kemény szilícium-nitrid/szilíciumkristály) a felszínhez nyomja. Lézerfényrel leképezett, felszíni topográfiát követő lézersugár-kitéréseket elektronikai úton vissza lehet csatolni a piezoelektromos transzducerek mozgására is, ami számos mérési változatot tesz lehetővé (felszín atomi, molekuláris struktúra, citoszkeleton, sejtmag szerkezete vizsgálható)



X.22. ábra. Az AFM működési elve

- **ELŐNYE:** (közel) fiziológias körülmények közötti méréseket tesz lehetővé; vizes közegben is lehet dolgozni; 3D-s kép; nem szükséges bonyolult előkészítés;
- **AKADÁLYA:** a sejtek igen változatos domborzatú felszíne. Minél laposabb annál jobban vizsgálható; csak nagyon kis felületekről lehet képet készíteni; több percre van szükség a pásztázásra; kicsi felbontóképesség
- A **fluoreszcenciamikroszkópban** a mintáknak a megvilágító fény által kiváltott fluoreszcenciáját képezzük le.
 - natív / intrinsic fluoreszcencia: az élő sejteket (szöveteket) felépítő anyagok egy része fluoreszkál (fehérjék, A-, B-, C-vitamin). Inkább szelektíven kötődő fluoreszcens festékeket (VI/3.3.3.) alkalmaznak.
- **ELVE:** a gerjesztést a megfelelő hullámhosszú fényrel végezzük, és az általában sokkal gyengébb emittált fényt a gerjesztőtől szétválasszuk
- Ha a gerjesztéshez ultrabolya fényre van szükség, akkor az UV fényt áteresztő speciális, kvarcból készült lencsét kell alkalmazni a megvilágító oldalon.
- Modern változat: argon-ion vagy argon-kripton (ion) vagy hélium-neon lézert
- **hogyan van egy web-es felület és akkor ott az eddig már regisztrált makromolekulákat használják fel hogy összehasonlítsák azt amit vizsgálnak**

3. Elektrosztatikus kölcsönhatások makromolekulákban

→ Van der Waals

→ kölcsönhatási energiákat: Elektrosztatikus kölcsönhatások → **Coulomb kölcsönhatás**

q_1 és q_2 ponttöltések r távolságban

potenciális energia
kölcsönhatási energia

$$E_{cb} = \frac{q_1 * q_2}{\epsilon * r}$$

(relatív) dielektromos állandó

→ A relatív dielektromos állandó ϵ

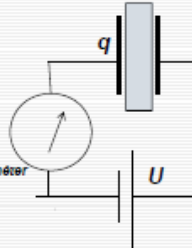
Definíció: kondenzátor kapacitása alapján

fégyveretek között vákuum → q_0

fégyveretek között dielektrikum → $q > q_0$

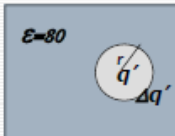
$$C = \frac{q}{U}, \quad C_0 = \frac{q_0}{U} \Rightarrow C > C_0$$

$$\epsilon = \frac{C}{C_0} > 1$$



A dielektrikum részecskéi polarizálódnak elektromos térben

→ Hidratációs energia: A végzett munka ha egy ϵ dielektromos állandójú közegbe (vízbe), egy r -sugarú üregbe (ionsugár) q töltést viszünk be (A Coulomb-potenciál-ból származtatott hidratációs energia)



$$\delta G = \frac{q' * \delta q'}{\epsilon * r}$$

$$\Delta G = \frac{1}{\epsilon * r} \int_0^q q' dq' = \frac{q^2}{2\epsilon * r}$$

→ **Dipól-kölcsönhatások:** ponttöltés – dipól, dipól – dipól, statikus dipól, forgó dipól, indukált dipól. Diszperziós kölcsönhatás van der Waals kölcsönhatás alapjelensége:

- a töltéeloszlás molekulákon belül az atomok gyors hőmozgása miatt fluktuál → tranziens töltésszeparációk
- egymás közelében levő molekulák tranziens dipólusmomentuma kölcsönhat → indukció, taszítás, vonzás
- a vonzó kölcsönhatás energiája alacsonyabb → nagyobb populáció → eredőben vonzó kölcsönhatás

→ A **hidrofób kölcsönhatás** Apoláris, hidrofób molekulák vízbejuttatásuk esetén egymás köré tömörülnek a vizet kizárják környezetükből. Köztük csak gyenge Van der Waals kölcsönhatások lépnek fel, de apoláris molekula körül olyan határfelület alakul ki, ahol a víz rendezettsége nagyobb (mivel H-kötés csak a víz felé lehetséges, a molekulák orientálódnak: végeredményben szinte minden H-híd lét-rejön), mint a folyadék belsejében (H-kötések ~75%-a alakul ki). Sokrészecskés rendszerek egyensúlyra törekvése az entrópiánövekedés ($\Delta S \geq 0$) vagy rendezetlenség irányába mutat: a vízmolekulák kizárják a hidrofób

molekulákat a rendezett határfelület csökkentése érdekében. A biológiai membrán molekuláinak poláris csoportjai víz felé, az apoláris csoportok a membrán belseje felé fordulnak.

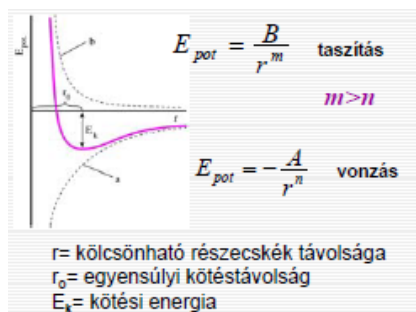
→ **Alacsony T, Magas T (RT):** A víz molekulák rendezett szerkezetet alakítanak ki egymással az apoláros molekula felületénél S csökken, de szegregációnál kevésbé, $\Delta H \sim 0$. **Diszperziós kh. erősödik víz-orientáció gyengül**

- $\Delta G = \Delta H - T\Delta S = \Delta G_{\text{szegr}} - \Delta G_{\text{oldott}} < 0$
- $\Delta S_{\text{szegr}} \sim \Delta S_{\text{oldott}}$, de $\Delta H_{\text{szegr}} < 0$ $\Delta G = \Delta G_{\text{szegr}} - \Delta G_{\text{oldott}} < 0$
- A szegregált és az elkeveredett állapot közötti különbség: szegregált állapotban a rendezésből eredő entrópia-változás kisebb. **alacsony hőmérséklet: „S-driven”, magas hőmérséklet: „H-driven”**

→ **Kovalens kötések:** Az egyszeres kovalens kötések megengedik a forgást, így sokféle alakú molekula alakulhatna – mégis a gyenge kötések révén olyan szerkezet jön létre, amely energiaminimummal rendelkező rendszert ad. A többszörös kovalens kötések merevek, ezáltal automatikusan meghatározzák az alakot.

$$E_{\text{kov}} = \frac{1}{2} \phi (x - x_0)^2$$

kötéserősség egyensúlyi kötéstávolság



→ A makromolekulák szerkezete és komplex-képzése a környezeti molekulákkal való kölcsönhatás jelenlétében energia-minimum-állapotot jelent

4. Példák dipól kölcsönhatásokra, az energia függése a távolságtól.

Kölcsönhatás	Energia-függvény távolság-függése	Átlagos kölcsönhatási energia (kJ/mól)
ion-ion	r^{-1}	200 - 300
ion - álló dipólus	r^{-2}	10 - 20
álló dipólus - álló dipólus	r^{-3}	1 - 2
dipólus - dipólus hőmozgás mellett	r^{-6}	0.3
diszperziós kölcsönhatás	r^{-6}	2

Dipól-kölcsönhatások: ponttöltés – dipól, dipól – dipól, statikus dipól, forgó dipól, indukált dipól. Diszperziós kölcsönhatás van der Waals kölcsönhatás alapjelensége:

**a töltéeloszlás molekulákon belül az atomok gyors hőmozgása miatt fluktuál → tranziens töltésszeparációk

**egymás közelében levő molekulák tranziens dipólusmomentuma kölcsönhat →

indukció, tasztítás, vonzás **a vonzó kölcsönhatás energiája alacsonyabb → nagyobb populáció → eredőben vonzó kölcsönhatás

$$E_{\text{disp}} = -\frac{1}{r^6} \frac{\alpha_1 \alpha_2 I_1 I_2}{3n^4 I_1 + I_2}$$

molekulák polarizálhatósága molekulák ionizációs energiája
közeg törésmutatója

A dipólus-dipólus kölcsönhatás a molekulavonzás -vagy más néven a másodrendű kötések egyik típusa. Ugyanis az aszimmetrikus töltéseloszlásúak, az azonos töltések taszítják az ellentétes töltések vonzzák egymást, s így orientált elrendeződés alakul ki: a dipólusok ellentétes töltésükkel egymás felé fordulnak. A dipólus-dipólus kölcsönhatás során a dipólus molekulák ellentétes pólusai közötti vonzás tartja össze a molekulákat. Hőmérséklet csökkenés hatására a kölcsönhatás következtében a molekulák közötti rend egyre irányítottabbá válik; szabályos elrendeződésű molekulahalmazok jönnek létre (elsősorban kristályos állapotban).

5. Példák dipól kölcsönhatásokra, a kölcsönhatási energia nagysága. Lennard-Jones

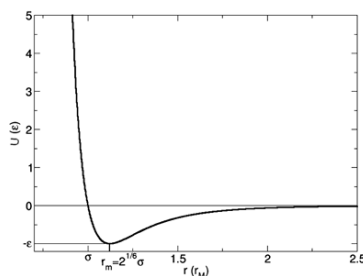
potenciál. (← pl. víz, A dipólus-dipólus kölcsönhatás gyenge másodrendű kötés, melegítés hatására olvad, párolog. A víz olvadáspontja 0 Celsius fok)

Túl az ideális-gáz modellen, a valódi anyagok termodinamikája. $(p + \frac{a}{v^2})(v - b) = RT$

Ez az ideális-gáz modellre származik. Nem ideális esetben:

A potenciál konkrét alakja pl. $U = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}$ ezt Lennard-Jones féle (empirikus)

formulának is nevezik. Itt A a vonzás erősségét adja meg, a B pedig a taszító tag együtthatója. Tehát ha a molekulák közti távolság nagy, vonzzák egymást, de ha közelítjük őket, egy bizonyos egyensúlyi távolság átlépésekor a taszítás válik erősebbé.



A Lennard-Jones potenciál alakulása a távolság függvényében

r = kölcsönható részecskék távolsága
 r_0 = egyensúlyi kötéstávolság
 E_k = kötési energia

$$E_{pot} = \frac{B}{r^m} \quad \text{taszítás}$$

$m > n$

$$E_{pot} = -\frac{A}{r^n} \quad \text{vonzás}$$

A taszító potenciált az elektronfelhők átlapolása okozza – rövid hatótávolságú kölcsönhatás

A vonzó kölcsönhatást a diszperziós/van der Waals potenciál adja →

$$E_{L-J} = 4E_0 \left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right)$$

Kötési energia

Többé-kevésbé polarizált, azaz (állandó) dipólus-momentummal rendelkező részecskék között fellépő irányított kölcsönhatás. Orientációs hatásnak is nevezzük, mert a dipólusmolekulák a **kedvező állapot irányába forgatják egymást**. Az adott környéken lévő molekulák többé-kevésbé azonos irányba állnak be dipólusaik szerint. A dipólusmolekulák kölcsönhatása rendezett szerkezetet alakíthat ki folyékony vagy szilárd halmazállapotban. A hőmérséklet és a résztvevő molekulák mérete meghatározó tényező. Dipól-dipól kölcsönhatás van a víz-, az ammónia- és a szén-dioxid-molekulák között. (pl: HCl, SO₂, CH₂O) A van der Waals-kötések közül a dipóluskötés a legerősebb. Szilárd anyagok és folyadékok a dipólusmolekulák között fordulnak elő leginkább.

6. A kovalens kötés harmonikus potenciál-modellje. Atomi rádiuszok.

Elsődleges kötések közé tartozik 2-6 eV/kötés $1\text{eV}=100\text{ kJ/mol}$

a molekula mindkét protonja körül, illetve azok között is relatíve nagy értékeket vesz föl, azaz a két alkotó atommag mindegyikére kiterjedő közös elektronállapot jön létre. A H_2 általában jellemzőek a kovalens kötéstípusra: **a molekulában összekapcsolódó atomokat közös elektronpályák elektronjai „tartják össze”**.

Kovalens kötéssel kapcsolódik össze például a Cl és a H a sósavban is, de a HCl molekula elektromos dipólusként viselkedik, ugyanis a kötés létrejötté során a H elektronja a Cl-hoz közelebb kerül, és így a pozitív és a negatív töltések „súlypontja” egymáshoz képest eltolódik. **A kovalens kötésű vegyületek többségét elektromos dipólusmomentummal (μ ; lásd I.2. megjegyzés) rendelkező poláris molekulák alkotják.**

A kovalens kötések családját több eV nagyságú kötési energia jellemzi, ami erős kötést jelent ($1\text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19}\text{ J}$)

- Különböző fajta atomok a molekulapályán lévő elektronokat eltérő mértékben vonzzák maguk felé.
- Az egyszeres kovalens kötések megengedik a forgást, így sokféle alakú molekula alakulhatna – mégis a gyenge kötések révén olyan szerkezet jön létre, amely energiaminimummal rendelkező rendszert ad. A többszörös kovalens kötések merevek, ezáltal automatikusan meghatározzák az alakot.

7. A Boltzmann-eloszlás, kötések felszakadása biológiai makromolekulákban

- A Boltzmann-eloszlás formulája alapján (lásd I/3.1.1.) – durván – megbecsülhető, hogy a kovalens kötések hány %-a lehet testhőmérsékleten felszakadva ($kT = 0,026\text{ eV}$).

Korábbi termodinamikai ismereteink alapján tudhatjuk, hogy amennyiben egy rendszer termikus egyensúlyban van (hőmérséklete állandó), akkor a rendszer teljes energiája (E) úgy oszlik el a rendszert alkotó részecskékre, pontosabban azokon belül is az egyes mozgásfajták, szabadsági fokok között, hogy **átlagosan minden szabadsági fokra $1/2kT$ energia jut** (ekvipartíció tétele; k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet).

- egy elszigetelt rendszerben milyen valószínűséggel, illetve milyen gyakorisággal fordulhatnak elő egy adott energiával rendelkező molekulák.
- a gázrészecskék sebességét írja le
- A Boltzmann-eloszlás N_i / N részecskére, melyek i állapotban, E_i energiával rendelkeznek →

$$n_i = \frac{N e^{-\frac{E_i}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}}}$$

$E_k \sim$ elsődleges kötések : kovalens			
	ionos	2 – 6	eV/kötés
	fémek		
$E_k \sim$ másodlagos kötések			
	H-híd	0.1 - néhányszor x 0.1	elektronvolt 1 eV = 23 kcal/mol ~ 100 kJ/mole
	Hidrofób kölcsönhatás	~ 0.1	
van der Waals	dipól – ponttöltés	~ 0.1-0.2	
	dipól – dipól	~ 0.02	
	dipól – indukált dipól	~ 0.01	
	időleges dipól (diszperziós)	~ 0.02	

Boltzmann eloszlás: az alacsonyabb energiájú
nívó populációja nagyobb → $N_1 > N_2$

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$$

Nagyon kis szám!
~ 0 → $e^0 = 1$!

8. A fény mint elektromágneses hullám. Fény és a biológiai anyag kölcsönhatása.

- hogy a fény **látható elektromágneses sugárzás**
- Az elektromágneses hullámokban az elektromos, valamint a mágneses térerősség az a fizikai mennyiség, ami térben és időben periodikusan változik („rezeg”).
- Maxwell elméletéből az is kiderül, hogy az elektromágneses hullámok transzverzálisak **← polarizálható**
- Az elektromágneses hullámok terjedési sebessége annyira közel esik a fény terjedési sebességéhez, hogy úgy tűnik nyomós okunk van arra következtetni, hogy a fény maga is egy, az elektromágneses törvények szerint az elektromágneses térben hullám alakjában tovaterjedő elektromágneses zavar.
- Így fénynek nevezzük az emberi szemmel érzékelhető, tehát a körülbelül 400 nm és 800 nm közötti hullámhosszal rendelkező elektromágneses hullámokat. A fény színe alapján, e két határon túli sugárzást ultraibolya valamint infravörös sugárzásnak nevezzük.

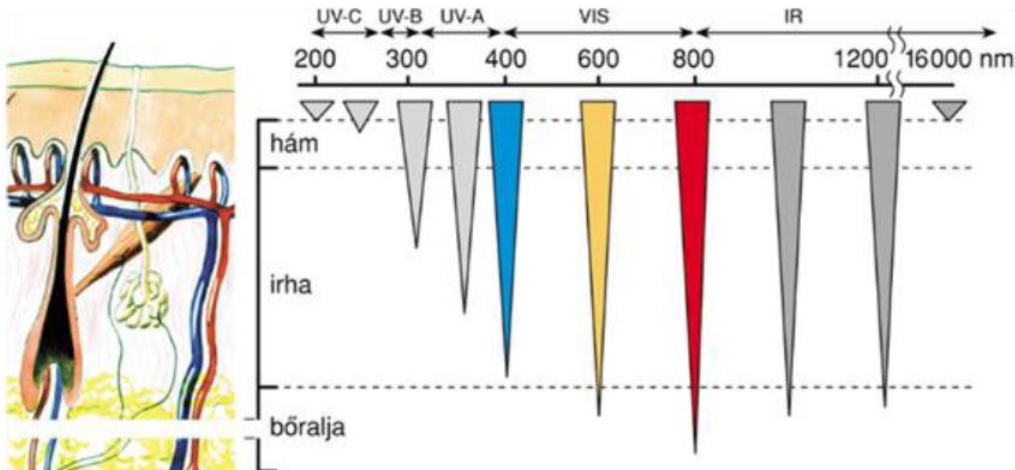
Fényelektromos jelenség (fotoeffektus): ultraibolya sugárzás hatására negatív elektromos töltéshordozók távoznak a megvilágított fém felületéről.

- A sugárzás intenzitását az amplitúdón kívül a hullám más paraméterei, például a frekvencia nem befolyásolják.
- Albert Einstein mondta, hogy **a fény hf nagyságú energiaadagokból, fotonokból áll** (ahol h a Planck-állandó, f pedig a fény frekvenciája), amelyek egyenes vonalban fénysebességgel mozognak **mint kis részecskék**.
 - Fény intenzitását két paraméter szabja meg: **I)** egyrészt a **fotonok egyedi energiája (hf)**, **II)** másrészt az **időegység alatt az adott felületre érkező fotonok száma (N)**.
 - Egy e^- egy foton tud kiléptetni a fémből, amennyiben van hozzá elegendő energiája.
 - e^- kilépés: ha $hf \geq W_k$ **$E_{kin} = hf - W_k$** (A kilépő elektron maximális kinetikus energiája)
 - Foton impulzus →
$$p = mc = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$$
 -
- Általánosan fogalmazva azt mondhatjuk, hogy fény kétféleképpen keletkezhet: vagy **hőmérsékleti sugárzással**, vagy **lumineszcencia** útján
 - Ez a **hőmérsékleti sugárzás**, ami **mindig elektromágneses sugárzás**, és amely a kisugárzó test hőmérsékletétől függően akár **fényt is** tartalmazhat.
 - A testre jellemző elnyelés mértékét az **abszorpció tényezővel (α)** adhatjuk meg, ami az **időegységenként a test által elnyelt (E_a) és a testet érő összes (E_0) sugárzási energia aránya: $\alpha = E_a/E_0$. → a sugárzás hullámhosszától függ, ezért a különböző testek összehasonlításakor mindig csak egy adott hullámhossz körüli szűk hullámhossztartományt veszünk figyelembe.**
- Az indukált és spontán emisszió közötti egyik legfontosabb különbség a fázissal kapcsolatos. Az indukált emisszió **rendezett, koherens folyamat**, míg a spontán emisszió rendezetlen inkoherens folyamat. Indukált emissziónál az új hullám ugyanolyan fázisban és ugyanolyan irányban bocsátódik ki, mint az őt kiváltó hullám, így az erősítés feltétele adva van. $J' = J_0 e^{-ikx}$

A biológiai hatás létrejöttének feltétele az, hogy a **fény** az élő anyagban **elnyelődjék**.

- A foton elnyelődésének következménye, hogy az elnyelő molekula gerjesztett (magasabb energiájú) állapotba kerül, ami érintheti külső elektronpályák elektronjait vagy a molekula rezgési, forgási állapotait.
- Elegendően nagy fotonenergiák esetén ionizáció is történhet. (7 eV-nál nagyobb energia elnyelése nyomán mehet végbe, de egyes aromás vegyületek már 4 eV fotonenergiával is ionizálhatók).

- A fényfotonok nem azonos eséllyel vesznek részt biológiai folyamatok kiváltásában:
- a szervezetet felépítő molekulák különböző hullámhossztartományokban abszorbeálódnak, vagyis rájuk jellemző abszorpciós spektrummal rendelkeznek.
 - a fény különböző hullámhosszúságú tartományai különböző mélységbe képesek behatolni szövetekbe.

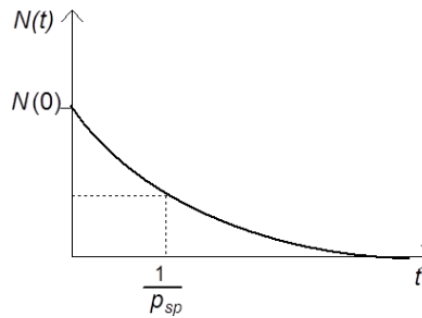


- ~~a nagyobb fotonenergia nagyobb áthatolóképeséget eredményez~~ ← NEM IGAZ, A bőr esetében például az UV-C tartománytól a hosszabb hullámhosszak felé haladva egyre nő a behatolási mélység egészen az IR-A tartományig, majd innen a IR-B, C tartományokban újra fokozatosan csökken.
- a látható fény 60-70%-a hatol be az irhába, az IR-A sugárzás 20%-a 3-3,5 mm mélységben az irha alatti rétegeket is eléri.
- Fényabszorpció: Egy adott energiájú foton behatolási mélységét befolyásoló tényező
- Mivel a sejtekben nagy mennyiségben jelen lévő **nukleinsavak és aromás aminosavak** elnyelési sávja az **UV-C, B** és kisebb mértékben az UV-A tartományba esik, ezért nyelődnek el nagy valószínűséggel már a legfelső sejtrétegekben. A látható tartományban abszorbeáló molekulák közül a **hemoglobint és a melanint** kell kiemelniük, de számottevő elnyeléssel rendelkezhetnek a **karotinok és a bilirubin** is.
- minél hatékonyabb egy bizonyos hullámhosszúságú fény egy folyamat kiváltásában, annál kisebb beeső energiasűrűsége van szükség egy adott mértékű változás létrehozásához, vagyis annál nagyobb a biológiai objektum hatáskeresztmetszete (← beeső energiasűrűség és beeső fotonszámnak reciproka). A hatáskeresztmetszetet a hullámhossz függvényében ábrázolva nyerjük az úgynevezett **hatásspektrumot**
- a fénynek nem csak lokális hatásai vannak (bőrben, illetve szemben való elnyelődés). Számos olyan fotobiológiai folyamatot ismerünk, amelyek kezdeti lépései, így a fényabszorpció és a primer fotokémiai reakció a bőrben játszódnak le, de **hatásaik** az egész szervezetet érintik. Ezek között említhetjük a **D-vitamin** szintézisét vagy az immunrendszernek az **UV-B** sugárzás hatására bekövetkező szuppresszióját.

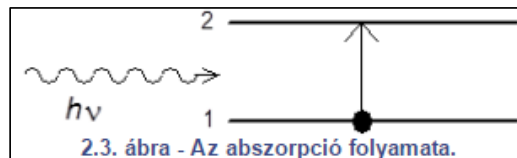
9. Fényelnyelés, fényemisszió.

→ Az elektromágneses térrel való kölcsönhatás következtében egy anyagi részecske, legegyszerűbb esetben egy atom lehetséges energiaszintjei között fénykibocsátásos illetve fényelnyeléses átmenetek fordulhatnak elő. Az emisszió feltétele, hogy az atomi rendszer gerjesztett állapotban legyen

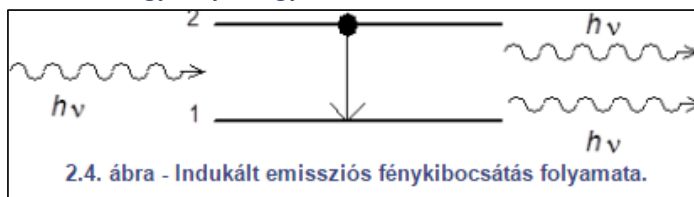
→ **SPONTÁN EMISSZIÓ:** Amikor az atom a magasabb energiájú E_2 állapotból egy $\nu \approx \nu_0$ frekvenciájú foton kibocsátásával kerül az alacsonyabb energiájú E_1 állapotba. A kibocsátott foton frekvenciájának legvalószínűbb értéke a ν_0 frekvencia, de attól eltérő is lehet, mivel az E_1 és E_2 energiaszintek csak a legvalószínűbb energiaértéket adják meg, a nívók nem végtelen keskenyek. ← **külső hatás nélkül bekövetkező, statisztikus eloszlású, inkoherens folyamat.**

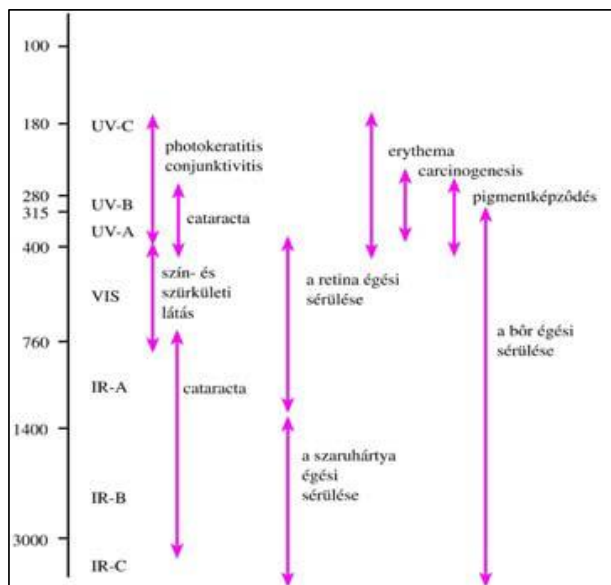


→ **ABSORPCIÓ:** az atom egy ν frekvenciájú foton hatására az E_1 állapotból az E_2 állapotba megy át, minek következtében a térben jelen lévő ν frekvenciájú fotonok száma eggyel csökken.

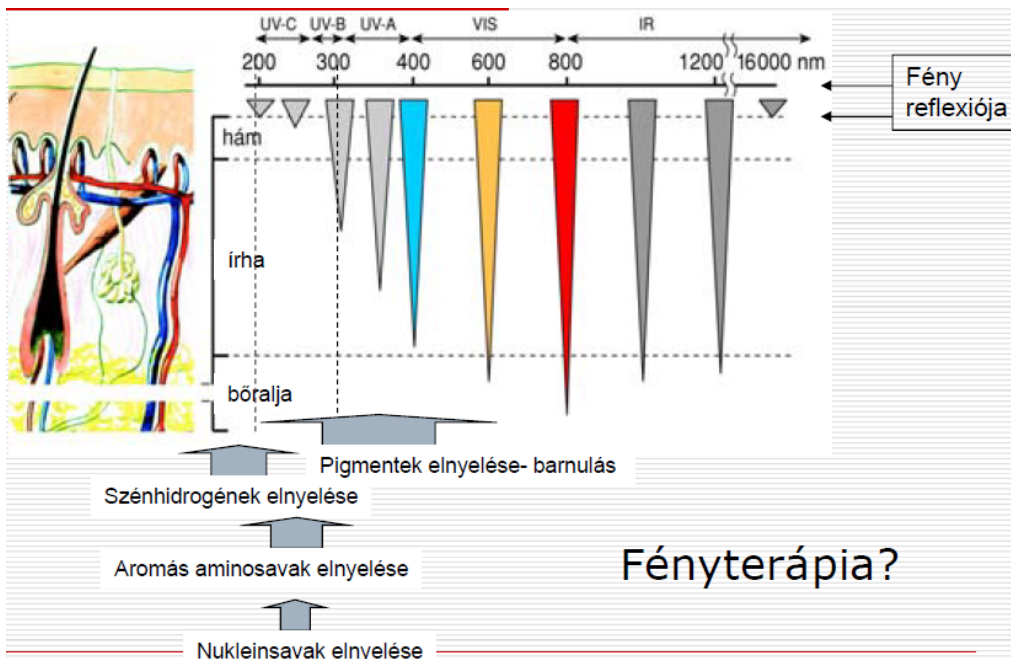


→ **Indukált emisszió:** Abszorpciós folyamat fordítottja. Egy ν frekvenciájú foton hatására egy ugyanolyan tulajdonságú "hasonmás" foton keletkezik, miközben az atom a magasabb energiájú E_2 állapotból az alacsonyabb energiájú E_1 állapotba kerül. A "hasonmás" foton ugyanolyan energiájú, irányú, mint a beérkező foton és az általa leírt elektromágneses hullám polarizációja és fázisa is megegyezik a beérkező foton által képviselt hullám megnevezett tulajdonságaival. ← **emittált fotonnal azonos frekvenciájú foton kiváltotta, azzal egyirányú, nagymértékben koherens emisszió**





10. Környezettel kölcsönható molekulák abszorpciós és emissziós spektruma, spektrális paraméterek, kiválasztási szabályok



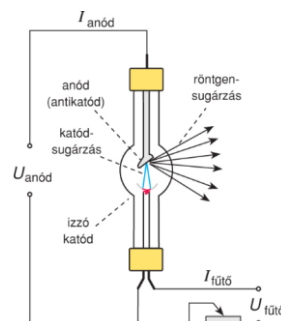
- a nagyobb fotonenergia nagyobb áthatolóképességet eredményez ← NEM IGAZ, A bőr esetében például az UV-C tartománytól a hosszabb hullámhosszak felé haladva egyre nő a behatolási mélység egészen az IR-A tartományig, majd innen a IR-B, C tartományokban újra fokozatosan csökken.
 - o a látható fény 60-70%-a hatol be az írhába, az IR-A sugárzás 20%-a 3-3,5 mm mélységben az írha alatti rétegeket is eléri.

- Fényabszorpció: Egy adott energiájú foton behatolási mélységét befolyásoló tényező
 - Mivel a sejtekben nagy mennyiségben jelen lévő **nukleinsavak és aromás aminosavak** elnyelési sávja az **UV-C, B** és kisebb mértékben az UV-A tartományba esik, ezért nyelődnek el nagy valószínűséggel már a legfelső sejtrétegekben. A látható tartományban abszorbeáló molekulák közül a **hemoglobint és a melanint** kell kiemelniük, de számottevő elnyeléssel rendelkezhetnek a **karotinok és a bilirubin** is.
- minél hatékonyabb egy bizonyos hullámhosszúságú fény egy folyamat kiváltásában, annál kisebb beeső energiasűrűsége van szükség egy adott mértékű változás létrehozásához, vagyis annál nagyobb a biológiai objektum hatáskeresztmetszete (← beeső energiasűrűség és beeső fotonszámnak reciproka). A hatáskeresztmetszetet a hullámhossz függvényében ábrázolva nyerjük az úgynevezett **hatásspektrumot**
- a fénynek nem csak lokális hatásai vannak (bőrben, illetve szemben való elnyelődés). Számos olyan fotobiológiai folyamatot ismerünk, amelyek kezdeti lépései, így a fényabszorpció és a primer fotokémiai reakció a bőrben játszódnak le, de **hatásaik** az egész szervezetet érintik. Ezek között említhetjük a **D-vitamin** szintézisét vagy az immunrendszernek az **UV-B** sugárzás hatására bekövetkező szuppresszióját.

11. Röntgensugárzás és fénysugárzás összehasonlítása. Az orvosi röntgenső mint sugárforrás. A röntgensugárzás spektruma és befolyásoló paraméterek.

Röntgensugárzás **keletkezése**: amikor elég nagy sebességű töltött részecskék valamilyen testbe ütköznek és lefékeződnek. A primer hatás az atomok gerjesztése/ionizációja, melyet közvetett hatások követnek, melyekben a sugárzás energiája más energiatípusra alakul.

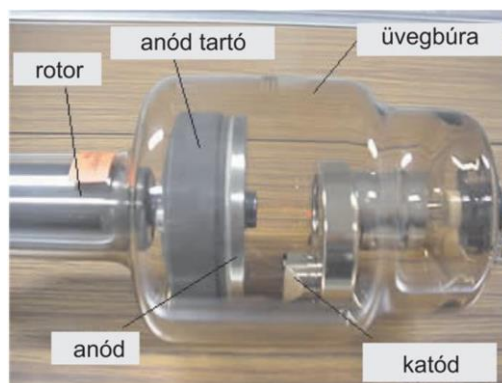
- nagyenergiájú elektromágneses sugárzás
- hullámhossza 10 nm-pm közé esik
- frekvencia ~30 PHz-EHz közötti
- ionizáló sugárzás (primer, szekunder energiaátadási mechanizmusok), mivel energiája 0,1 keV- 1 MeV között lehet
- diagnosztikában és a terápiában használják
- A karakterisztikus röntgensugárzás az adott anyagi minőségű atomra jellemző színkép alapján meghatározhatók ismeretlen nagyobb rendszámú atomok. Ugyanezen módszer segítségével a kristályok, ásványok, kőzetek összetételének vizsgálata is lehetséges.



Röntgenső: A legújabb készülékekben már a sugárforrást sem mozgatják, hanem egy rögzített röntgensőben felgyorsított elektronnyalábot **térítenek el tekercsekkel a megfelelő irányba**, és egy wolframgyűrűbe ütköztetve irányítják a testre.

→→→ **Megoldás a röntgenső anódjának hűtésére.**

A tárcsa alakú anód forgástengelyétől eltérő helyen történik meg a katód-sugár becsapódása, így forgás esetén a felmelegedés helye egy körgyűrű alakú



tartományon belül állandóan változik. Körbefordulás közben lehetőség van a hő elvezetésére

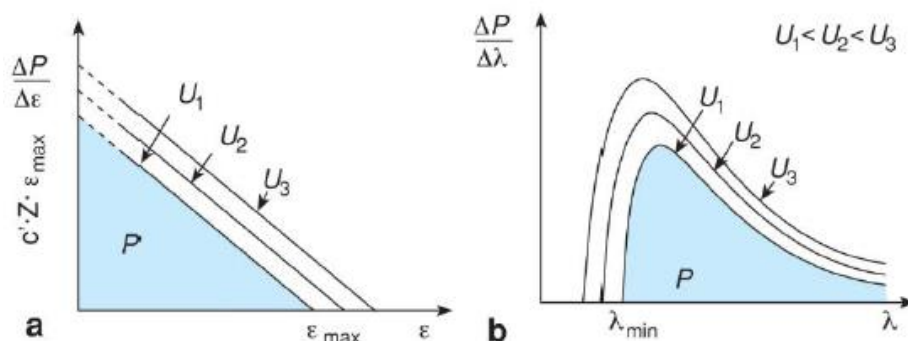
A röntgenscő: *egy vákuumcső *katódját egy egyszerű fűtőáramkör segítségével izzítjuk.

- A katód az **izzítás mértékétől** (fűtőáramtól $I_{\text{fűtő}}$) függően folyamatosan **e- bocsát ki**. ← **$I_{\text{anód}}$ nagyságát szabja meg.**
- A katódból **kilépő** e- a katód és az anód közé kapcsolt **nagyfeszültség** ($U_{\text{anód}}$) hatására: **felgyorsulnak** → **becsapódnak az anódra** (← nagy rendszámú ← magas olvadáspontú fém).
- Ebből lép ki a röntgensugárzás, amelynek energiafedezetét az elektronok kinetikus energiája szolgáltatja. A becsapódó elektronok energiájának legnagyobb része azonban (> 99 %) hővé alakul, ezért szükséges az anód hűtése.

$$E \cdot U_{\text{anód}} = \epsilon_{\text{max}} = h \cdot f_{\text{max}} \quad \lambda_{\text{min}} = \frac{h \cdot c}{e} \cdot \frac{1}{U_{\text{anód}}}$$

Duane-Haunt trv: h a Plank-állandó, c a fénysebesség, e az elektron töltése ← természeti állandók

- a törvény azt fejezi ki, hogy a **határhullámhossz fordítottan arányos a gyorsítófeszültséggel**



A fékezési sugárzás emissziós spektrumát, azaz az adott energiájú fotonok által kisugárzott teljesítményt (pontosabban a $\Delta P/\Delta \epsilon$ mennyiséget) mutatja a fotonenergia (ϵ) függvényében.

- hogy annál nagyobb a kisugárzott összteljesítmény, minél több elektron csapódik időegységenként az anódra, tehát minél nagyobb az anódáram ($I_{\text{anód}}$).

$$P_{\text{összcs}} = C_{\text{Rtg}} \cdot U_{\text{anód}}^2 \cdot Z \cdot I_{\text{anód}}$$

$U_{\text{anód}}$ a gyorsítófeszültség, $I_{\text{anód}}$ az anódáram, Z az anód anyagának rendszáma, C_{Rtg} pedig egy arányossági tényező.

- A karakterisztikus sugárzás az anód anyagára **jellemző** („karakterisztikus”) emissziós vonalakból áll, amelyek a fékezési sugárzás folytonos spektrumából nőnek ki. A karakterisztikus vonalak csak bizonyos nagyságú gyorsítófeszültség elérése felett tapasztalhatók, amelynek nagysága függ az anód anyagától.
- **üvegburában, vákuumban két lumineszkáló ernyő, egy fotokatód és hengerszimmetrikus elektródrendszer** helyezkedik el.
 - Az átvilágított test képe első lépésben az 1. lumineszkáló ernyőn jön létre, ahol a nyaláb intenzitásával arányos, a test által gyengített sugárzás intenzitásának megfelelő számú fénypoton keletkezik.
 - A következő lépésben az egyes pontokból származó lumineszcencia-fény a fotokatód megfelelő pontjára vetül, ahol intenzitásával (fotonszámával) arányos számú fotoelektron vált ki.

- A katódra és az elektródrendszerre kapcsolt feszültség (25-30 kV) olyan elektromos teret hoz létre, amely a fotokatódból kilépő elektronok számára – amellet, hogy gyorsítja azokat – leképező elektronlencse szerepét tölti be.
- A felgyorsuló elektronok a 2. lumineszkáló ernyőre jutnak, amelyen az elektronlencse közvetítésével az 1. ernyőn kialakult röntgenkép optikai kép formájában válik láthatóvá.
- Ez a kép valódi, fordított állású, kicsinyített, és – ami különösen lényeges – a létrehozásában közreműködő elektronok nagy energiája (25-30 keV) következtében a fényereje nagy. E körülmény további képkezelést és feldolgozást tesz lehetővé.

- használatával 10-20%-ra csökkenthető sugárterhelés a közönséges átvilágítással szemben;
- képerősítő-videokamera-katódsugárcső együttes alkalmazásával elsötétítés nélkül is jól látható a röntgenkép, (orvosi beavatkozások közben)
- a videojel rögzíthető, és akár mozgóképként is visszajátszható;
- digitális röntgenképkalkotást, ill. -kezelést tesz lehetővé.

12. A röntgensugárzás elnyelődése és diagnosztikai alkalmazása.

A röntgensugárzás elnyelődését általánosan az exponenciális sugárgyengítési törvény írja le:

$$J = J_0 \cdot e^{-\mu x}$$

J_0 a planparallel síkokkal határolt, homogén, x vastagságú abszorbens réteggént elképzelt

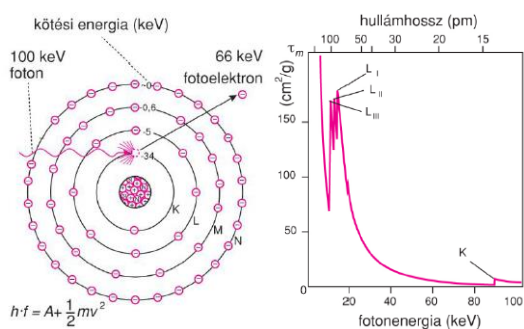
elnyelő közegre merőlegesen **beeső sugárnyaláb intenzitása**, J a réteg után, a belépő nyaláb irányában tapasztalható **intenzitás** és μ a **gyengítési együttható**.

Az elnyelő közeg (orvosi alkalmazásokban a szövetek), valamint a közeg és a sugárzás kölcsönhatásának összes, a jelenség szempontjából lényeges tulajdonsága a μ állandóban van összesűrítve. Kicsit egyszerűsíti a folyamat jellemzését, ha leválasztjuk a kölcsönhatás mennyiségi részét a „ ρ ” sűrűsége keresztül szorozótényezőként

lehet megtenni. $\mu = \mu_m \cdot \rho$ [cm²/g] **tömeggyengítési együttható** (sugárzás fotonenergiájától és az anyagi minőségtől való függést tartalmazza)

→ **RÖNTGENDIAGNOSZTIKA:** 10–200 keV fotonenergia-tartomány.

- az elnyelődés vezető primer folyamata a **fotoeffektus**



↑ a röntgenfoton ilyen esetben **teljes energiáját** átadja a **közeg atomi kötélekéhez tartozó és a belső pályák egyikén található elektronnak**. Ennek hatására az utóbbi **kiszakad** atomi kötélekéből. A beeső foton teljes energiája ($\epsilon = hf$) részben a kiszakított e- kötési energiáját részben az így felszabadult elektron mozgási energiáját fedezi $\epsilon = E_{\text{köt}} + E_{\text{mozgási}}$

→ Mozgási energiával távozó elektron a közegben (például a szövetekben) másodlagos (fékezési és karakterisztikus) röntgensugárzást is kelthet.

→ Végül a kinetikai energiáját elvezett e- befogódhat valamilyen atomi kötélekbe, pl. vízmolekulákkal léphet kölcsönhatásba, és hidratált e- formájában okozhat további ionizációkat. A fotoeffektus gyengítési együtthatójára a μ helyett a $\tau = \tau_m \cdot \rho$.

- τ_m függ a röntgensugárzás fotonenergiájától

- Bizonyos fotonenergiáknál az abszorpció valószínűsége megnő – karakterisztikus abszorpciós vonalak, élek láthatók, amelyek a kisebb fotonenergiák felé jelentősen emelkedő, folytonosan görbülő függvényre rakódnak rá. Az abszorpciós vonalak (L_I , L_{II} , L_{III}), illetve ϵ (K) az ábrán az illető nívókról történő ionizációra jellemző átmeneteket jelölik

A hagyományos röntgenképek a beteg testének a röntgensóvel ellentétes oldalán lévő lumineszkáló ernyőn (röntgenképernyő) vagy röntgenfilmen jönnek létre. A röntgensugár egymás mögött lévő, különböző denzitású (abszorpció együtthatójú) szövetrétegen halad keresztül, intenzitásának gyengítésében valamennyi réteg szerepet játszik **← a képeken az egymás mögötti részletek árnyéka egymásra vetül**

$$J = J_0 \cdot e^{-(\mu_1 x_1 + \mu_2 x_2 + \dots)} \quad \lg \frac{J_0}{J} = (\mu_1 x_1 + \mu_2 x_2 + \dots) \cdot \lg e$$

13. Fehérjék atomi szintű szerkezet-meghatározása. Kísérletes és számítógépes megközelítések.

„kis felbontású” technikák: azonosítás izoelektromos pontja, molekulatömege és/vagy aminosav-összetétel (Számos **web-alapú** fehérjeazonosítási szolgáltatás érhető el az ExPASy proteomikai szerveren)

„nagy felbontású” technikák: a pontosabb azonosításra és jellemzésre alkalmas peptid MS-ujjlenyomat-adatokon át

*röntgenkristallográfiai *neutrodiffrakciós *elektronmikroszkópiai *elektrondiffrakciós

módszerek (kristályos állapotú fehérjeszerkezeteket szolgáltatnak), *NMR spektroszkópia

- Az NMR-spektroszkópia esetében az egymáshoz közel elhelyezkedő atomok közötti távolságok nyújtanak információt a helyi konformációról. Röntgenkristallográfia esetén a kiindulási adat a röntgendiffrakciós mintázat. Elektronmikroszkópnál a molekula teljes formájának képe a kiindulási pont.
- **Röntgenkristallográfiai:** a fehérjéket először **elő kell állítani** → **tisztítani** → **kristályosítani**. Megfelelő kristály **←** röntgensugarakkal több irányból intenzíven besugározva elektronikus detektorokkal diffrakciós minták nyerhetők
- **Elektronmikroszkópia** (EM): nagy makromolekuláris komplexek szerkezetének meghatározására alkalmazható.
- **Elektrondiffrakció** (ED): használható 3D-sűrűség térkép létrehozására a röntgen-diffrakciókhoz hasonló módszerek alkalmazásával.

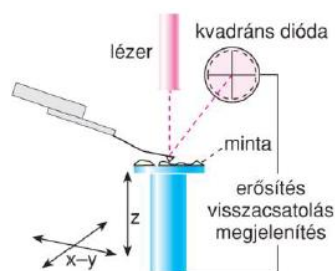
„A szimulációinkban azzal az egyszerűsítéssel élünk, hogy a molekulaláncban tömegpontok vannak, amelyek között kapcsolat áll fenn. A molekulákat úgynevezett bolyongásos szimulációval modellezzük, ahol az egyes pontok egy rácshálón helyezkednek el”

14. Az AFM technika, piezoelektromos hatás, vizsgálati lehetőségek, korlátok

- Az igazi áttörést és a főleg, de nem kizárólag felszíni struktúrák természetes körülmények közötti atomi, sőt szubatomi szintű láthatóvá tételét az atomerőmikroszkóp (atomerő-mikroszkópia, AFM) feltalálása és szinte azonnali megépítése jelentette. Az AFM minden fajta anyag, köztük elektromosan nem vezető anyagok vizsgálatára is kiválóan alkalmazható, szemben az első ilyen jellegű módszerrel, az itt részletesen nem tárgyalt pásztázó alagúteffektusos (STM) mikroszkópiával, amely főleg vezető anyagok vizsgálatára alkalmas.
- **ELVE:** egy közel atomi méretre kihelyezett tűt mozgatunk pásztázó- transzducerek segítségével atomok, molekulák vagy nagyobb objektumok felett a felszíntől igen kis távolságra, és a tű felfüggesztése olyan, hogy az atomokat nem tudja egymástól elszakítani, mert ahhoz gyenge a felfüggesztés rugóállandója,

mennyiben képes a tű mozgása a felszíni – atomi vagy molekuláris méretű – topográfiai viszonyokat tükrözni.

- a Pauli-féle kizárási elv miatt a tű és a vizsgált anyag elektronfelhőinek a taszítóereje az, ami a gyenge rugóállandó mellett nem engedi, hogy a tű behatoljon az anyagba. Ugyanakkor a sztanol rugóállandója elég erős ahhoz, hogy a tűt (néhány nm, **angström átmérőjű „félgömb, anyaga** kemény szilícium-nitrid/szilíciumkristály) a felszínhez nyomja. Lézerfényvel leképezett, felszíni topográfiát követő lézersugár-kitéréseket elektronikai úton vissza lehet csatolni a piezoelektromos transzducerek mozgására is, ami számos mérési változatot tesz lehetővé (felszín atomi, molekuláris struktúra, citoszkeleton, sejtmag szerkezete vizsgálható)



X.22. ábra. Az AFM működési elve

- **ELŐNYE:** (közel) fiziológiás körülmények közötti méréseket tesz lehetővé; vizes közegben is lehet dolgozni; 3D-s kép; nem szükséges bonyolult előkészítés;
- **AKADÁLYA:** a sejtek igen változatos domborzatú felszíne. Minél laposabb annál jobban vizsgálható; csak nagyon kis felületekről lehet képet készíteni; több percre van szükség a pásztázásra; kicsi felbontóképesség

15. Mágneses dipólus viselkedése mágneses térben –klasszikus és kvantummechanikai leírás

- A mágneses momentum arra utal, hogy az atom mágneses dipólust képez. Az atom mágneses momentumának két összetevője
 - ****van a spinből eredő**
 - ****a mag körül keringő elektronokból eredő mágneses momentum.**
- A különböző anyagok viselkedését külső mágneses térben csak az atom mágneses momentumának nagysága és iránya határozza meg. Ilyenkor az elektronok forgását és mag körüli keringését megzavarja, hogy mágneses terük a külső térrel együtt eredő teret alkot. Ez erőt gyakorol a kialakult „pörgettyűre”, amely mint minden erőhatás alatt álló pörgettyű, precessziós mozgást végez. Az így kialakult mozgásból származó mágneses momentum iránya a külső térrel ellentétes.
- Mivel a mágneses momentumnak egy külső mágneses térben potenciális energiája van, ha mágneses térbe testet helyezünk, akkor az eredő mező és a test viselkedése csak atomjainak saját mágneses momentumától függ.
- Az anyagok atomjaiban az elektronok **kétféle mozgást végeznek:** mágneses dipólus megjelenését eredményezi.
- Az egyik mozgás az e- nak az **atommag körüli mozgása:** mágneses jelenségek egyszerű leírásánál e- nak az atommag körüli mozgását elemi köráramokként fogjuk fel → atomi mágneses dipólusoknak felelnek meg. **Ezek adják az elektronok ún. pályamozgásából származó dipólmomentumot.**
- Az atomi mágneses dipólusok hatása a mágneses erőterre homogén, izotróp anyagokban
 - Paramágneses anyagok: az atomoknak nullától különböző mágneses dipólmomentuma van (ez az anyagok többsége) az atomi dipólusok külső mágneses tér nélkül rendezetlenül

helyezkednek el, és mágneses erőterek átlagosan semlegesítik egymást. Ha azonban az anyagot mágneses erőterbe tesszük, akkor a dipólmomentumok igyekeznek beállni az erőter irányába dipólusok többsége az erőterrel közel párhuzamosan áll be

- hosszú, vékony rúd a mágneses térrel **párhuzamosan** igyekszik beállni
- Diamágneses anyagok: az atomok eredő mágneses dipólmomentuma nulla. Ha azonban egy ilyen anyagot mágneses erőterbe teszünk, akkor az atomokban létrejön egy ún. indukált mágneses dipólmomentum. Az így keletkezett mágneses dipólusok a külső erőterrel ellenkező irányban igyekeznek beállni.

→ Impulzusmomentummal rendelkező elektromos töltéssel bíró részecskék mágneses dipólus-momentummal is rendelkeznek

- Impulzusmomentum ~ körmozgás → töltés körmozgása = köráram → mágneses dipólus
- Mágneses momentum vektor: Iránya párhuzamos az impulzusmomentummal, iránykvantálás irányítottasága ellentétes

$$\vec{\mu}_l = - \frac{e}{2m} \vec{L}$$

Mágneses momentum vektor

$$E = E_0 - |\vec{B}| * |\vec{\mu}| * \cos \phi = E_0 - B \mu_z$$

Klasszikus: MM energiája mágneses térben → Az energia mágneses tér nélkül

E csökken, ha $\cos \phi \rightarrow 1$ → a mágneses tér orientálja a momentumot parallel irányba

Kvantumos: MM → kétféle orientáció parallel és antiparallel orientációk → energia-különbség

$$\Delta E = E_2 - E_1 = (E_0 - E_{magn.2}) - (E_0 - E_{magn.1}) = \mu B \cos \phi + \mu B \cos \phi = 2 \mu_z B$$

16. Zeeman effektus, Larmor frekvencia, a mágneses térerősség szerepe.

→ **Zeeman effektus:** az a jelenség ha egy atomot külső mágneses térbe helyezünk, az energiaszintjei eltolódnak, az eredetileg degenerált szintjei felhasadhatnak

→ Az atom foton kibocsátásával képes energiát leadni. **Foton** energiája az atom kezdeti és végállapotbeli energia szintjeinek különbsége lesz ← egy vonalat jelent a spektrumban.

- Amennyiben a kezdeti vagy végállapot rendelkezik mágneses momentummal úgy az atomot mágneses térbe helyezve ez a **vonalt több vonalra hasad** ← szimmetrikusan helyezkednek el.
- A frekvencia eltolódás ← vagyis a színekp vonalak távolsága **arányos a mágneses tér nagyságával**.
- Az atomban keringő e- nak, mint köráramnak a mágneses momentuma arányos a pálya-impulzusmomentummal μ_L .
- A teljes mágneses momentumba beleszámít még az elektronspinhez rendelt μ_S mágneses momentum is.
- A **felhasadás mértéke** függ az alkalmazott **mágneses térerősségtől** ← **iránykvantálást mutat**

→ A felhasadást az atomi mágneses momentumok ($\sim \mu$) és a külső mágneses tér (B) kölcsönhatásaként fellépő energia okozza: $\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$.

- a skalárszorzat függ a mágneses tér és a mágneses momentum relatív irányától
- 1. Kvantumos viselkedésű spin-mágneses momentumok mágneses térben kétféle orientációt vesznek fel, ezek energiában különböző állapotok, és az energiakülönbség lineárisan nő a mágneses tér nagyságával

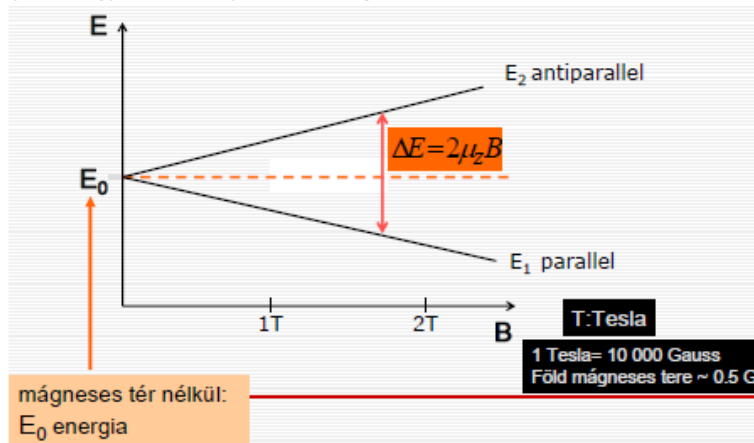
→ A precesszió frekvenciáját a Zeeman felhasadás nagysága (μ és B) határozza meg ← **A gerjesztő fotonenergia frekvenciája azonos a Larmor-frekvenciával!**

$$\Delta E = 2\mu B = hf$$

Proton-momentum

precesszió frekvenciája
Larmor frekvencia

Az állapotváltozást előidéző elektromágneses hullám frekvenciája a Larmor-frekvencia, amely függ az atommag tömegétől, spinjétől és egyenesen arányos a külső mágneses térrel



Az energiaátadás feltétele, hogy az átvevő molekula vibrációs frekvenciája rezonanciában legyen a Larmor precesszióval.

17. A mag mágneses rezonancia – jelenség. Proton-MRI.

A mágneses magrezonancia – más néven nukleáris mágneses rezonancia, angol rövidítéssel NMR – a mágneses mezőbe helyezett anyagban fellépő azon jelenség, melynek során egy másik, rádiófrekvenciás (elektro)mágneses térrel besugározva azt bizonyos frekvenciákon – azaz „rezonanciaszerűen” – elnyeli. A jelenség az atommag kvantummechanikai tulajdonságain alapul. Azon, hogy az atommagok spinjének, azaz saját impulzusmomentumának és az ezzel arányos mágneses momentumának a mágneses tér irányára vett vetületének függvényében az energiaállapotuk felhasad, azaz különböző értékűvé válik. Az ezen állapotok közötti energiájú elektromágneses hullámmal gerjesztve őket a hullámot elnyelik és átmennek egy másik állapotba, majd ezután ezt az energiát kibocsátva visszamennek az eredeti állapotba. Az állapotváltozást előidéző elektromágneses hullám frekvenciája a Larmor-frekvencia, amely függ az atommag tömegétől, spinjétől és egyenesen arányos a külső mágneses térrel.

→ Az atommagok spinkvantumszáma lehet 0, 1/2, 1, 3/2, 2... ~4.

→ Az atommagok spinkvantumszáma meghatározza, hogy az adott mag mágneses-e

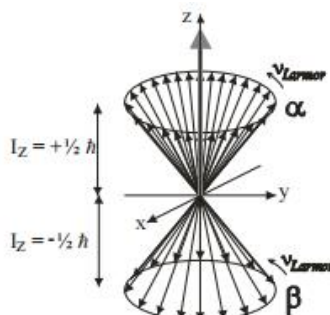
Az NMR névben szereplő mágnes szó = csak erős mágneses térben lép fel. A vizsgálandó oldatot / szilárd mintát a méréshez egy **cseppfolyós He**-al hűtött **szupravezető elektromágneses tekercs belsejébe juttatjuk**.

→ NMR spektroszkópiával azok az atommagok vizsgálhatók, melyekben vagy a protonok, vagy a neutronok, vagy mindkettőjük száma páratlan ← ha páros akkor az adott izotóp nem vizsgálható

- proton, neutron (az elektronhoz hasonlóan) **feles spinű részecske**: ha páros számmal fordulnak elő a magban, akkor párokat képezve eredőjük nulla, míg ha páratlan a számuk, akkor ezek összege különbözik nullától. Az eredő spin lehet $I = 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2$, stb.
- Minden részecske, aminek spinje van, mágneses dipólusmomentummal is rendelkezik, vagyis úgy viselkedik, **mint egy kicsi iránytű** ← ezért kell mágneses térbe helyezni az anyagot.

- A külső mágneses tér hatására az atommagok mágneses momentumai az iránytűhöz hasonlóan igyekeznek beállni az észak-dél irányba, de a mikrovilágban működő sajátos szabályok megtiltják, hogy az iránytűk pontosan beállhassanak az északi irányba,
 - a spin (impulzusmomentum) vektoriális mennyiség, melynek hossza és iránya van. Az $I = 1$ spinű atommagok esetén a lehetséges irányok olyanok, hogy $I_z = +1, 0$, vagy -1 lehet. ***
 - A spin és a mágneses momentum vektorok mindig párhuzamosak egymással.
 - A mágneses momentum igyekszik befordulni az északi irányba, de magával kell fordítania a spin vektort is. Ez azonban az *** szerint csak adott irányba állhat be. Így a mágneses momentum sem állhat be északi irányba

Az így álló mikromágnesek és a z-irányú külső tér között azonban erőhatás lép fel, aminek eredményeként a spinek ahelyett, hogy nyugalomban állnának, folyamatosan és egyenletes sebességgel körbejárnak a kúp palástja mentén. Ezt a mozgást precessiónak nevezzük és sebességét egy ún. Larmor-frekvenciával jellemezzük



1. ábra. A feles spinű magok egyensúlyi állapota és z-irányú makroszkopikus mágnesezettsége.

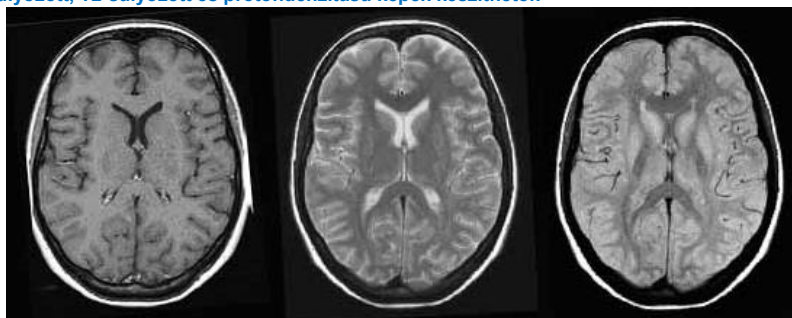
→ Minél erősebb a külső tér (B) vagy a magmágnes (γ -val jellemeztük), a precessió annál nagyobb sebességű.

18. Az MRI módszerben diagnosztikai céllal felhasznált paraméterek.

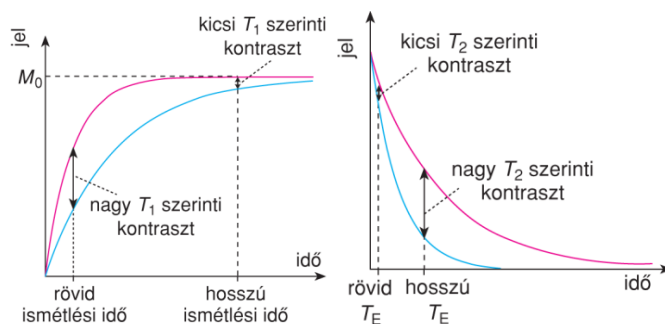
A Föld mágneses mezője kb. 0,5 G (Gauss) erősségű, az átlagos hűtőmágnesek 35–200 G, az iparban használatos eszközök 300–5000 G erősségűek. Az MRI vizsgálat során 10 000 - 30 000 G (1-3 Tesla) erősségű mágneses teret alkalmaznak

Kontraszt befolyásoló paraméterek: **szövetek mágneses inhomogenitása **hőmérséklet **különböző mozgások (szöveti diffúzió) **véráramlás ←szuszeptibilitás MR képképzés, MR-angiográfia, MR spektroszkópiás képképzés, perfúziós MR, diffúziós MR, funkcionális MR, kinematikus MR (kontrasztanyagok)

→ **Felhasznált paraméter:** ρ (protonsűrűség), T_1 (spin-rács) és T_2 (spin-spin) relaxációs idő ← T_1 -súlyozott, T_2 -súlyozott és protondenzitású képek készíthetők

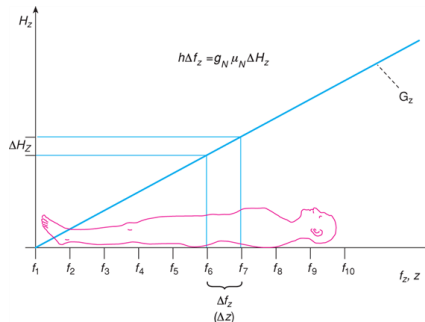


- A **T1-súlyozott** felvételek: **részletdúsak** kiválóak anatómiai viszonyok megítélésére.
- A momentum B_0 irányú vetülete a 90° -os impulzus után visszatér a „z” irányhoz
 - **T1 rövid** → $M_z(t)$ nagy → **fényes pixel** → **zsírszövet világos (500-1000 ms)**
- A **T2-súlyozott** felvételeken: a víz fényesen ábrázolódik ← liquor fehér. Az agy esetében a T2-súlyozású felvételeken a szürkeállomány világosabb a fehérállománynál.
- A lokális mágneses terek miatt a koordinált precesszió elhangolódik
 - **Vizes közeg: inhomogenitások kiátlagolódnak** → **fázisvesztés lassú** → T2 **nagy** → **fényes pixel (50-100 ms)**
- A **protondenzitású** felvételeken: szabad víz / ödémákra jellemző kötött víz elkülönül, a szabad víz sötétebb, folyadéktartalmú részeket elkülöníthetők a szolid lézióktól (élénk, világos színűek)



19. A képelemek kiválasztása az MRI módszerben.

Emberi testen belül egy gerjesztésre kiválasztott mintaszettet jelölünk ki a szeletkijelölő gradiens segítségével. A vizsgált térfogatelemeket (voxelket) tartalmazó mintaszett általában a H_0 külső mágneses térrel egyező irány (z tengely) mentén, arra merőlegesen helyezkedik el. Ennek megfelelően a szeletkijelölő gradiens segítségével az emberi testen belül a z irány mentén tájékozódhatunk. A z tengely mentén a különböző helyekhez különböző NMR-rezonancia-frekvenciák tartoznak. A két fizikai mennyiség, a hely és a frekvencia közötti összefüggést a mágneses tér gradiensértéke teszi egyértelművé. A vizsgálat számára kijelölt szelet vastagságát a szeletkijelölő gradiens meredeksége és a besugárzó rádiófrekvenciás tér sávzélessége határozza meg a rezonanciafeltétel szerint



- A modern MRI-készülékekben használatos időkímélő „többszelet -technika, amelynek alkalmazásával a spin-rács relaxációs idő eltelte alatt szeletről szeletre való előrehaladás is végbemegy
- non-invasive módszer (de: kontrasztanyagok toxicitása?)
 - Csont-szövet nem zavar: pl. gerincvelő vizsgálata UH, CT
 - Felbontás: ~5 mm vastag szelet, 1.5x1.5 mm képelem – igen jó mint a CT, de a kontraszt élesebb
 - 3D rekonstrukció lehetősége
 - Lágy szövetek, elsősorban zsírszövetek – agyszövet de széleskörű alkalmazás: nyak, mellkas, alhas (máj, lép, hasnyálmirigy, vese..) vázizomzat, ízületek
 - × **a készülék és a mérés drága**
 - × **3D képhez hosszú adatgyűjtési idő –pszichológiai problémák**

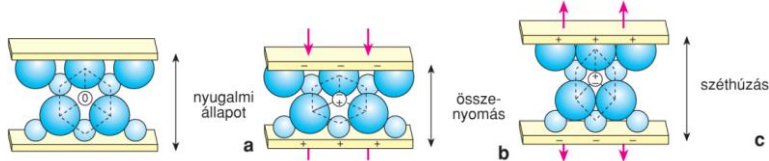
Megjegyzés [D.Ch2]: A teljes vizsgálati mátrix letapogatása viszonylag hosszú időt vesz igénybe, ennek megfelelően az MRI-vizsgálatok egyik fő törekvése a vizsgálati idő csökkentése. A vizsgálati idő csökkentésére a leírt impulzusszekvencia magától kínálta a lehetőséget, ugyanis két szeletkiválasztó gerjesztő impulzus alkalmazása között – mint azt már korábban taglaltuk – viszonylag hosszasan (0,4–1,8 s) várakoznunk kell a spin-rács relaxáció folyamatának végbemenetelére várva.

20. A sugárzás intenzitásának szerepe az UH diagnosztikában.

Az UH előállítására piezoelektromos tulajdonsággal rendelkező kristályból (pl. kvarc) alkalmasan kimetszett darabot, vagy megfelelő előkészítést követően a piezoelektromos jelenséget mutató kristályokhoz hasonlóan viselkedő kerámiaplakát alkalmaznak. A megfelelő kezelés magas hőmérsékleten, erős elektromos térrel történő orientálást jelent.

→ **Piezoelektromos jelenség** lényege: a lapka alkalmas felületein töltésszétválás tapasztalható, ha mechanikailag deformálják. ← az ott elhelyezett elektródok között **feszültség mérhető**.

- **inverz** piezoelektromos hatás: elektromos térben (azaz rákapcsolt feszültség hatására) megváltozik a lapka **vastagsága**.

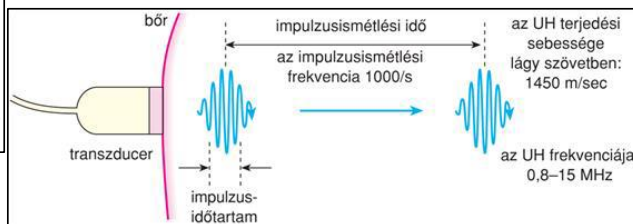
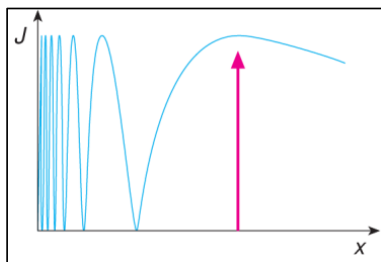


a) A pozitív és negatív töltések súly-pontja egymásba esik.

b) Nyomás; c) széthúzás: a kristály deformálódik, a töltések súlypontja szétválak, azaz **feszültség keletkezik**.

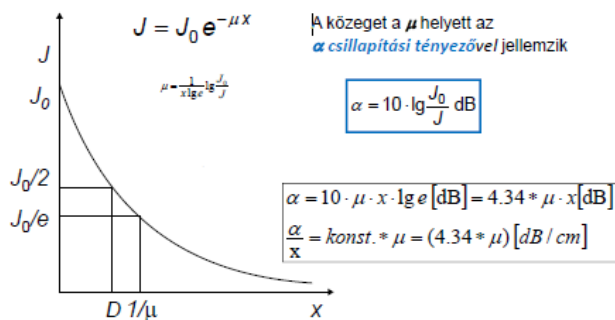
→ A tengelytől laterális irányban távolodva az intenzitás csökken

**Az UH-nyaláb intenzitásának változása axiális irányban. A nyíllal jelzett hely a közel és távotér határa



A hang terjedési sebessége és a reflektálófelületek távolsága (néhány cm) alapján a szükséges szünet **időtartamára ms** nagyságrend adódik. **Impulzusnak hossza** ennél **lényegesen rövidebb μ s-os** tartományú. Ezek eredményeképp a diagnosztikában leggyakrabban az 1–10 MHz ($1 \text{ MHz} = 10^6 \text{ Hz}$) fordul elő. **Ebből következik, hogy az UH-impulzus időtartama (pulzusidő) alatt csupán néhány rezgés lejátszódására van lehetőség.**

- a sugárzás intenzitásának határt kell szabni a túl nagy nyomásingadozások elkerülésére
- az előírásokban megadott intenzitás határértékek mindig átlagértékek (mindig meg kell nézni, milyen átlagolásra vonatkoznak)
- A diagnosztikában általában használt határérték 10 mW/cm_2 , azonban előfordulnak olyan orvosi előírások is, amelyek 100 mW/cm_2 -t engednek meg
- az ingadozások tartománya a sejtek méretével egyezik meg: a jelentős mechanikai igénybevétel elég a **szövetek sejtjeit összetartó kötőszövetek lebontására, üregek képzésére**
- Szövetekben az UH intenzitása gyengül: **abszorpció**



A hanghullámban a közeg részecskéinek mozgásállapota, egyúttal mozgási energiája is továbbadódik.

Az energiaterjedés jellemzésére a különböző sugárzásoknál, így a hanghullámoknál is általánosan használt mennyiség az **intenzitás**: sugárzás irányára merőlegesen elhelyezett egységnyi felületen időegység alatt áthaladó energiát jelenti (W/m^2).

A sugárzás átlagos intenzitása a hullámmozgás amplitúdójával van kapcsolatban, **egyenesen arányos annak négyzetével**

$$J = \frac{1}{2Z} \Delta p_{\max}^2 \quad J = \frac{1}{Z} \Delta p_{\text{eff}}^2$$

21. Akusztikai impedancia, fajlagos csillapítás, szerepük a diagnosztikai képalkotásban.

Az illesztő réteg akusztikus impedanciáját (Z) úgy kell megválasztani, hogy az aktív egység és a testszövet akusztikus impedanciája között legyen. Így érhető el a maximális energiakicsatolás.

Az aktív egységet az UH-kicsatolással ellentétes irányában egy **tompító-egység** fedi.

Ebben az irányban a cél az UH-energia elnyelése, ezért olyan anyagot választanak, amelynek UH-abszorpcióképessége nagy.

A tompító-egység impedanciája kisebb, mint az aktív egység impedanciája.

Az energiaelnyelés hatásfoka kapcsolatban van az UH-impulzus frekvenciájának elkentségével (sávszélesség).

Ha ezen egység nagy hatásfokkal tompítja az UH-energiát, akkor a sávszélesség nagy, ha pedig az energia tompítás hatásfoka kicsi, akkor a sávszélesség is kisebb.

→ **Akusztikus impedancia**: a nyomás és a részecske sebességének hányadosa

- Megmutatja, hogy mennyire áll ellen a közeg annak, hogy a részecskéit mozgásba hozzuk, azaz mennyire „kemény” akusztikus szempontból $Z = p/v$
- a hang közegbeli terjedési sebességének és a közeg sűrűségének a szorzataként $Z = \rho v$.

→ **Fajlagos csillapítás [dB]**: Sok esetben a szövetek abszorpció tulajdonságát ezzel a mennyiséggel

$$\alpha_{\text{fajl}} = \frac{\alpha}{f \cdot x}$$

jellemzik.

22. Az UH echo elve, A, B, TM – képek, 2D és 3D képek

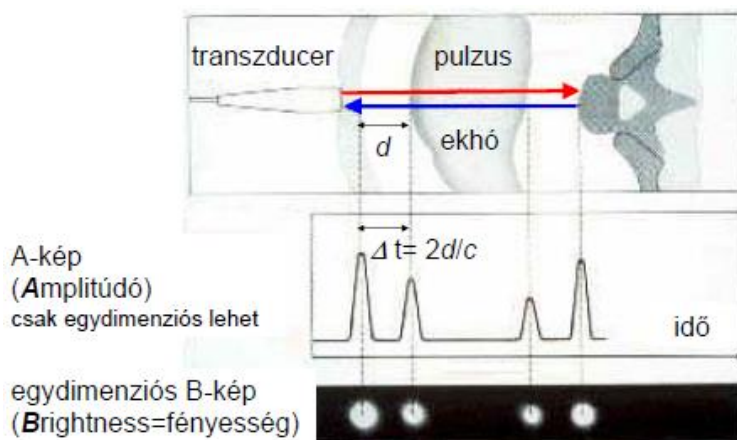
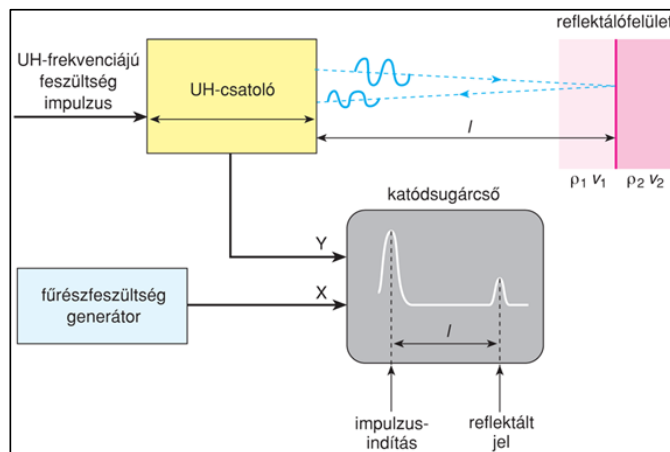
→ A módszer neve az „**amplitúdó**” szóra utal: a készülék detektor oldala az echo jelek amplitúdójával arányos amplitúdójú egyenfeszültség impulzusokat állít elő → ezek vezérlik a katódsugárcső katódsugarának **y** irányú kitérését.

→ keskeny nyalábot előállító, rögzített helyzetű UH-fejjel mérnek → echojelek egyetlen irányra vonatkoznak.

→ A kibocsátott **UH-impulzussal szinkrón** indul a **katódsugár x irányú eltérítése**.

→ A különböző mélységű felületekről egymás után visszaérkező UH-impulzusok a képernyőn az x irány mentén (**időtengely**) egymás után jelennek meg.

- A katódsugár x irányú mozgásának sebességét ismerve → echojelek visszaérkezési ideje az induló jelhez képest leolvasható a készülék képernyőjéről.
- A mérés fő információtartalma tehát az egyes echojelek beérkezési ideje ($t_1, t_2, \dots$)
- A képen látható impulzusok nagyságából (amplitúdójából): **echojelek amplitúdójára is következtethetünk.**
- FÜGG: ****közegek akusztikus impedanciájától **szóródási jelenségektől **abszorpció mértékétől**



23. A Doppler effektus alkalmazása az UH diagnosztikában.

A hullám frekvenciájában és ezzel együtt hullámhosszában megjelenő változás, mely amiatt alakul ki, hogy a hullámforrás és a megfigyelő egymáshoz képest mozog

Az olyan hullámok esetében, mint a hanghullámok, amelyek valamilyen közegben terjednek, a megfigyelő és a forrás közeghez viszonyított sebességével kell számolni. A teljes Doppler-effektus a két mozgásból eredő hatásból származik.

- A sípoló vonat, szirénázó mentőautó esetén jól ismert tapasztalat, hogy a felénk közeledő hangforrás hangja magasabb, mint a tőlünk távolodóé. Ennek az az oka, hogy a hullámhosszmegváltozik, ha a hangforrás haladó mozgást végez. A mozgás irányába kibocsátott hullámok rövidülnek, az ellenkező irányúak hosszabbodnak. A hullám sebessége maga nem változik, ezért az álló megfigyelő a forrásától eltérő frekvenciájú hangot hall.

→ Ha a megfigyelő és a forrás relatív sebessége megegyezik, és a hullám sebességéhez képest kicsi, mindkét esetben nagyjából azonos módon változik meg az észlelt frekvencia.

24. Példa biomolekulák mikroelektronikai alkalmazására.

<http://www.termeszetvilaga.hu/szamok/tv2013/tv1311/vonder.html>

B – csoport vizsgáztató: Prof. Zrínyi Miklós

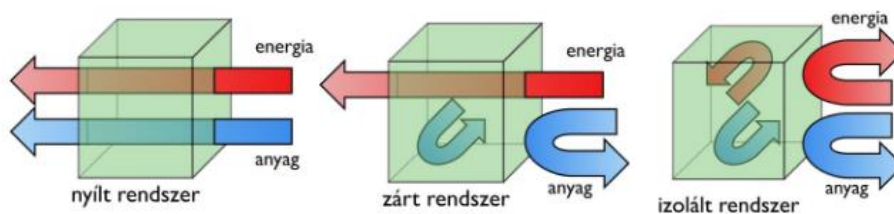
1. A termodinamikai rendszerek típusai

- Élőrendszerek működéséhez elengedhetetlen ismeret.
- termodinamikai törvények szabják meg, hogy egyensúlyi állapotban milyen arányban lesz jelen a komplex és az azt alkotó komponensek
- Rendszerek: a világnak azt a képzel / valós határfelülettel elkülönített részét, amelynek tulajdonságait vizsgáljuk. A termodinamikai rendszer éppúgy állhat egyensúlyban lévő egykomponensű, egyfázisú anyagból, mint az egyensúly felé törekvő többkomponensű, többfázisú részrendszerek ún. termodinamikai testek halmazából. Mindazt, amit a rendszer nem foglal magában, és amivel a rendszer a határfelületen keresztül érintkezik, környezetnek nevezzük.

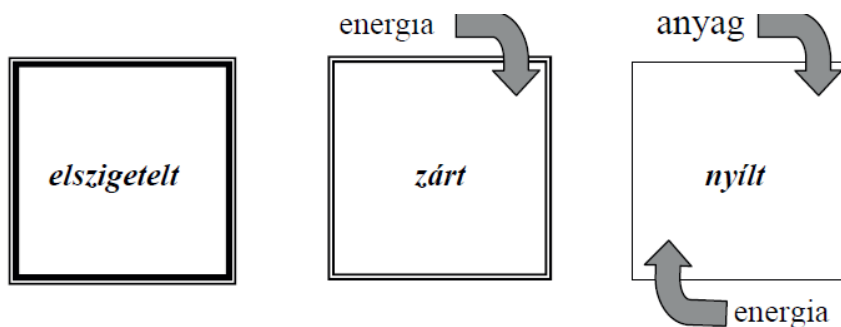
Segítségével tanulmányozhatjuk egy rendszerben egyidejűleg ható, de alapvetően eltérő (a fizikában önálló diszciplínaként kezelt) fizikai és kémiai kölcsönhatásokat, valamint folyamataikat.

→ RENDSZER típusai:

- Nyílt: a rendszer és a környezete közötti határfelületen anyag és energiaátáramlás is megengedett
- Zárt: az energiaátáramlás megengedett, de anyagátáramlás nem
- Izolált rendszer/elszigetelt: a határfelületen sem energiaátáramlás, sem anyagátáramlás nem történhet.



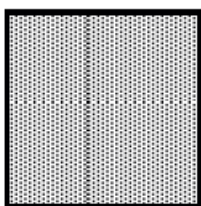
- Izoterm: ha hőmérsékletét a környezet (termosztát) állandó értéken tartja,
- Izobár: ha nyomásának állandóságát a környezet (manosztát) biztosítja,
- Izoterm-izobár: ha mindkét fenti feltétel egyszerre teljesül.



→ A termodinamikai rendszer tulajdonságainak **térkoordinátáktól** való függése alapján lehet:

- homogén: az egyes makroszkopikus tulajdonságok minden pontban azonos értéket mutatnak (pl. tökéletesen összekevert gázelegy),
- inhomogén: a makroszkopikus sajátságok helyről-helyre változnak, de a tulajdonságok térbeli eloszlását folytonos függvény írja le (pl. igen nagy térfogatú gázban a nyomás a magasság növekedésével csökken),

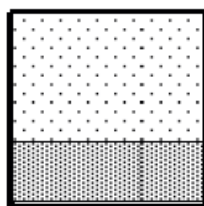
- heterogén: a fizikai és kémiai tulajdonságokban ugrásszerű változások vannak, az egyes fázisokat valóságos határfelület választja el egymástól (pl. víz-jég keverék).
- A termodinamikai rendszert **komponenseinek irányfüggő** tulajdonságai alapján is csoportosíthatjuk. A rendszer lehet:
- izotróp: az anyagi tulajdonságok a tér minden irányában azonosak, nincsenek kitüntetett irányok (pl. gázok),
 - anizotróp: fizikai és kémiai tulajdonságok a tér különböző irányokban nem azonosak, kitüntetett irányok vannak (pl. a réteges szerkezetű grafit).



homogén



inhomogén



heterogén



anizotróp

2. A belső energia járulékai

→ legfontosabb jellemzője az **E** energiája.

$$E = E_{pot} + E_{kin} + U$$

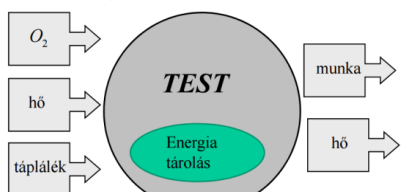
- a rendszer helyzetéből adódó E_{pot} potenciális energiából
 - az esetleges helyváltoztatásból származó E_{kin} kinetikus energiából
 - az U belső energiából
- A belső energia kémiai szerkezettől függő molekuláris kinetikus és kölcsönhatási energiákból tevődik össze. Magában foglalja:
- a molekulák U_{trans} haladó,
 - U_{rot} forgó
 - U_{vibr} rezgési mozgásának kinetikus energiáját
 - U_{gerj} elektrongerjesztési energiákat
 - molekuláris kölcsönhatások $U_{kölcs}$ energiáját
 - U_0 zéruspont energiát ← megkülönbözteti az egyes anyagokat egymástól, kémia szerkezettől függ
- $$U = U_0 + U_{trans} + U_{rot} + U_{vibr} + U_{gerj} + U_{kölcs}$$
- **nem tartalmazza** az egész rendszernek, mint makroszkopikus testnek a kinetikus és potenciális energiáját
- U_{trans} , U_{rot} , U_{vibr} energia gyűjtők: **molekuláris kinetikus energiák** ← egyenesen arányos a hőmérséklettel.
 - kölcsönhatási energiákat gyűjtőnéven: **molekuláris potenciális energiának**
- egy termodinamikai rendszer **U**-ja az összes molekula / atom U_0 , a hőmozgásából származó **kinetikus energiának**, az intermolekuláris kölcsönhatásokból származó **potenciális energiának** és az **elektrongerjesztési energiának** az összege. Befolyásolható:
- molekuláris kinetikus energiák megváltozásával (transzlációs, rotációs és vibrációs)
→ **hőhatással**
 - potenciális energiák megváltozásával → **átlagos távolság módosítással**
-
- **Tehát megváltozik ha:**
- változik a hőmérséklet
 - változik a molekuláris vagy halmaz szerkezet

- változik az intermolekuláris kölcsönhatásokból származó energia
 - valamelyik elektronpálya gerjesztett állapotba kerül
- A belső energia extenzív mennyiség.
- Egy összetett rendszer belső energiája a rendszert alkotó termodinamikai testek belső energiáinak összege.
- Mivel a termodinamikai rendszer szerkezeti adottságai egyértelműen meghatározzák, változása csak a **kezdeti és végállapottól függ, ezért a belső energia állapotfüggvény.**
- A belső energia abszolút értékét nem ismerjük, csak megváltozásáról beszélhetünk ($U_{\text{kezdő}}$, $U_{\text{végző}}$)
- $$\Delta U = \int_k^v dU = U_v - U_k$$
- $\Delta U > 0$, ha a rendszer belső energiája **növekszik**
- $\Delta U < 0$, ha a rendszerből **energia áramlik a környezetbe**

3. Intermolekuláris kölcsönhatások

- Az intermolekuláris kölcsönhatások intenzitása csak a molekulaszerkezettől függ
- Az intermolekuláris kölcsönhatások módosítják az egyes anyagok moláris energiatartalmát.
- Az intermolekuláris kölcsönhatások közül a dipólus-dipólus kölcsönhatás energiája függ a hőmérséklettől, a többi nem.
- az intermolekuláris vonzó kölcsönhatások kedvezően hatnak a rövidtávú rendeződésre, fordítottan arányosan a távolság hatodik hatványával (lásd Lennard-Jones-féle potenciál)
- jóval kisebb energiatartalmú, molekulák között ható ún. intermolekuláris kölcsönhatások
- amelyeket kötése energiájukra utalva **gyenge kölcsönhatásoknak, másodrendű kötések**
 - Ezek az összetartó erők önmagukban **stabilis molekulák között hatnak**, kötőerejük rendszerint legfeljebb 40 kJ mol⁻¹ körüli érték.
- a kölcsönhatási energia nagy távolságban jelentéktelen, **max** az adott intermolekuláris kötésre jellemző távolságtartományban éri el, majd a távolság további csökkenésével erősen **taszító** jellegűvé válik.
- az összetartó erők jellege szerint: ****elektrosztatikus**diszperziós kölcsönhatások**
- a részt vevő molekulák típusa szerint: ****poláris**apoláris molekulák között ható erők**
- A legfontosabb 2. rendű kötések a **hidrogénkötések** **dipól-dipól kölcsönhatások** (van der Waals-erők)
- **H-kötés:** hidrogén-donor és hidrogén-akceptor tulajdonságú atom között jön létre.

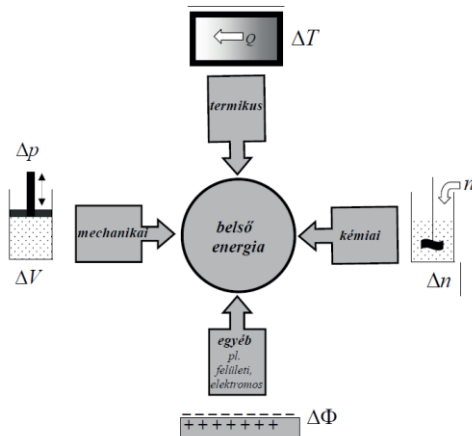
4. Biológiai termodinamikai rendszer



Az élő rendszerek termodinamikai értelemben nyitott rendszerek, környezetükkel együtt alkotnak zárt rendszert **Élő sejtekben** lezajló (bio)kémiai folyamatok azért mennek maguktól végbe, mert a rendszernek és környezetének az összes entrópiája növekszik.

5. A belső energia megváltozása és elemi energiaközlési típusok

- Az energiamegmaradás trv: energia nem keletkezhet és nem is semmisülhet meg.
- A TermR U-ja csak: környezettel történő kölcsönhatások következtében fellépő **anyagtranszportok** és **energiacserék** során változhat meg.
 - Elszigetelt rendszer belső energiája állandó.
- a belső energia **extenzív mennyiség** ← értéke függ a termodinamikai rendszert felépítő komponensek és fázisok mennyiségétől
- Egyfázisú, egykomponensű rendszert. Ennek belső energiája, n az anyag mennyisége mólokban kifejezve és U a moláris belső energia → $U = nU_m$
- Ha a rendszer több, egymással kölcsön nem ható fázisból áll, F számú fázisra → $dU = \sum_{i=1}^F U_{m,i} dn_i$



← A belső energia és a legfontosabb termodinamikai kölcsönhatások.

A belső energia teljes megváltozása az egyes kölcsönhatásokhoz tartozó energiacserék összegeként írható fel.

A belső energia változása annyi tagból tevődik össze, ahányféle kölcsönhatásban a részt vesz a vizsgált test vagy rendszer

Elemi energiaközlési típusok:

- **Mechanikai kölcsönhatások:** I. csop: térfogat nem változik II. csop: térfogatváltozással jár

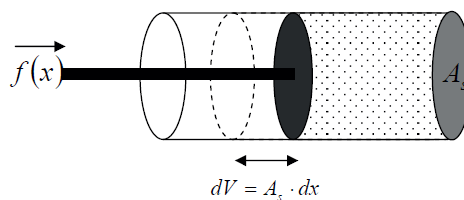
$$W_{\text{mech}} = - \int_{x_k}^{x_y} f(x) dx$$

$$W_{\text{mech}} = - \int_{V_k}^{V_y} p dV$$

A negatív jel: az $f(x)$ ellenerővel szemben a rendszer által végzett munka csökkenti a rendszer belső energiáját.

← Ha az F változik az elmozdulás során, akkor a mechanikai kölcsönhatáshoz tartozó energiacserét az egyenlet integrálásával kaphatjuk meg

← Az elemi munka a nyomás és a térfogatváltozás szorzata



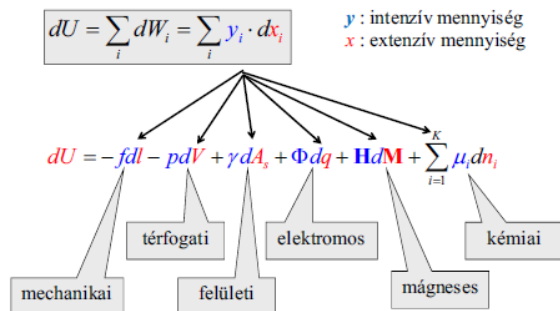
- **Felületi kölcsönhatás**

- A határfelületen lévő részecskék más molekuláris környezetben vannak, mint a fázis belsejében lévő, más erők hatnak rájuk, így más az energiatartalmuk is.
- Új felületet létrehozni csak **energiabefektetés** árán lehetséges.

- **Kémia kölcsönhatás:** a molekulák transzportjához vagy átalakításához szükséges energia

- minden egyes kölcsönhatáshoz tartozik egy-egy jellemző **intenzív és extenzív mennyiség**, melynek **szorzata** megadja a **kölcsönhatáshoz tartozó elemi energiacserét**. Az elemi energiacserékre jellemző, hogy **ÚTFÜGGVÉNYEK**.

$$\Delta U = \Delta Q + \sum_i \Delta W_i$$



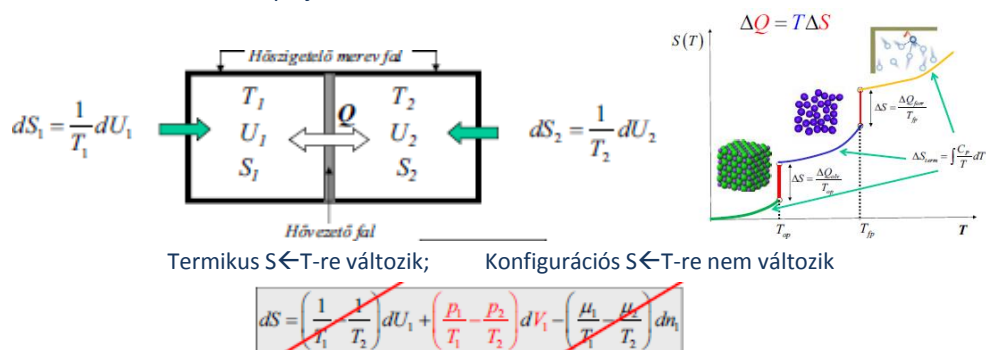
- Van a belső energiának egy olyan része, amely a többi extenzív mennyiségtől függetlenül is változhat.
- Ezt az "önmagában történő belső energiaváltozást" célszerű az elemi energiacserékhez hasonlóan egy intenzív és egy extenzív mennyiség szorzataként felírni
- Termikus kölcsönhatás $dQ = TdS$ ← hőhatással előidézett U változás (S: termikus entrópia)

$$dU = TdS - pdV$$

A **jég** olvadásához hőt kell befektetni, de mindaddig amíg a jég teljes mennyisége vízzé nem alakul, a **hőmérséklet értéke nem változik**. Hasonló a helyzet a forrásnál is. Mindaddig, amíg az összes folyadék gőzzé nem alakul, a hőmérséklet **állandó** értéken marad. Az állandó hőmérsékleten lejátszódó halmazszerkezeti átalakulásokkal kapcsolatos hőt **látens hő**nek nevezzük.

6. Az entrópia

- fizikai mennyiség: egy rendszer rendezettségét jellemzi.
 - Minél kevésbé rendezett/nagyon rendetlen a rendszer, annál nagyobb az entrópiája.
- az entrópia csak pozitív mennyiség lehet
- **állapotfüggvény** és **NEM MEGMARADÓ extenzív** állapotjelző: megváltozása a test két állapota között reverzibilis folyamat során felvett redukált hőmennyiségek előjeles összegével egyenlő.
- Ha egy rendszer adiabatikusan zárt: a rendszerben lejátszódó spontán folyamatok során a rendszer **entrópiája mindaddig nő, amíg be nem áll az egyensúlyi (p,T) állapot**.
- **Egyensúlyi állapotban a rendszer entrópiája maximális**.
- Izolált rendszer entrópiája **nem csökkenhet**



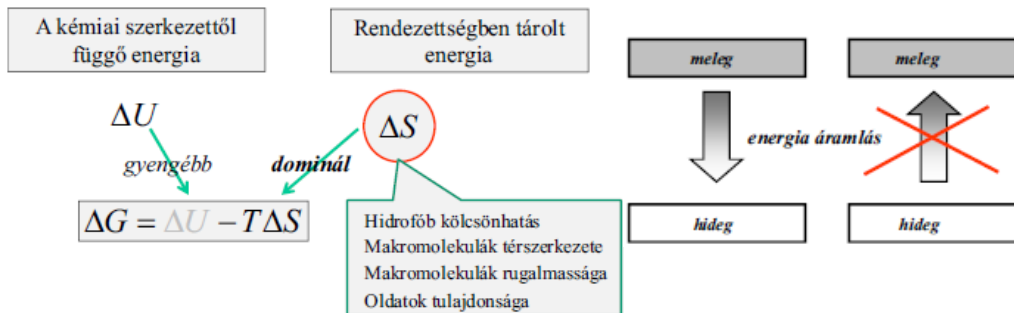
7. A termodinamika I. főtétele

- az **energiamegmaradást** fejezi ki: az energia a termodinamikai folyamatok során átalakulhat, de nem keletkezhet, és nem veszhet el
- Egy rendszer belső energiájának változása egyenlő a rendszerrel közölt hő és a rendszeren végzett munka összegével

$$dU = TdS - pdV + \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i + \dots + \Delta W_{\text{mech}} = \Delta U - \Delta Q - \sum_i \Delta W_i$$

Egy termodinamikai rendszer akkor képes munkavégzésre ($dW_{\text{mech}} < 0$), ha a belső energiáját csökkenti ($dU < 0$), vagy ha környezetéből hőt von el ($dQ > 0$), vagy más formában energiát ($dW_i > 0$) vesz fel.

8. A termodinamika II. főtétele



- folyamatok irányát szabja meg
- Elszigetelt rendszerben az önként lejátszódó (kiegyenlítődési) folyamatok során az entrópia növekszik

A falhoz dobott hógolyó deformálódik, mechanikai energiájának egy része hővé alakul, valamennyi hó megolvad,
DE NEM tapasztaljuk, hogy
 a víz hóvá fagyva, a hógolyó gömb alakot venne fel, a fal kicsit lehülne és a hógolyó visszarepülne oda, ahonnan érkezett.

- a természetes folyamatok **irreverzibilisek**: Nincs olyan valóságos folyamat, amelyet visszafelé is lejátszathatnánk úgy, hogy sem a rendszerben, sem pedig a környezetben ne maradjon vissza semmilyen változás.
 - Hőt **nem** lehet teljes mértékben munkává átalakítani.
 - Hő **önként csak magasabb** hőmérsékletű helyről áramlik **alacsonyabb hőmérsékletű hely felé**.
 - Izolált rendszer entrópiája **nem csökkenhet**

9. A termodinamika III. Főtétele

→ tökéletes kristályos anyag **entrópiája abszolút nulla fok hőmérsékleten zérus.**

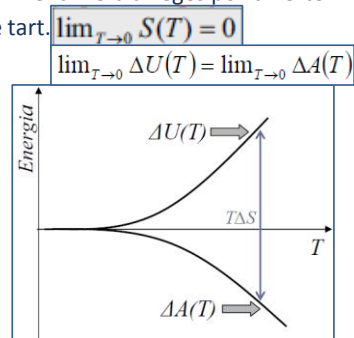
→ A tétel egyik legfontosabb következménye, hogy az abszolút zérus hőmérséklet (0 K) véges sok lépésben nem érhető el

→ ideális fogalom, mivel olyan abszolút tiszta kristályos anyag nem fordul elő

→ amikor a rendszer T-e az abs 0 érték felé közelít a TermDinRend-k S-a a véges pozitív érték felé, az S hőmérséklet szerinti deriváltja pedig a zéró felé tart.

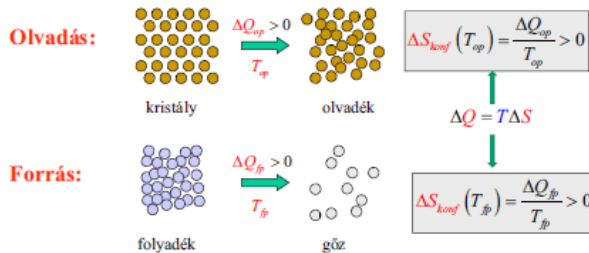
$$S(T) = S^0(T^0) + \int_{T^0}^T \frac{C_p}{T} dT + \Delta S_{konfig}$$

Standard entrópia



→ Minél **bonyolultabb** szerkezetű egy molekula, annál $\uparrow\uparrow$ a standard entrópia.

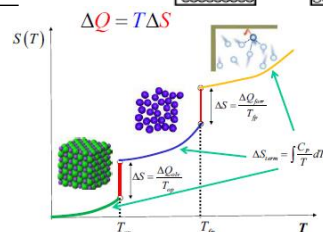
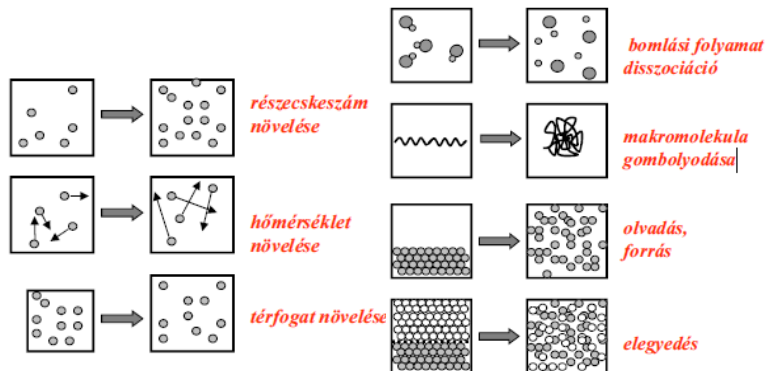
10. Entrópia, mint a molekuláris rendezetlenség mértéke



$$S = k_B \ln W$$

Boltzmann összefüggés

$$k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \quad \text{---} \quad k_B = \frac{R}{N_{Av}}$$



11. Entalpia, szabadenergia és szabadentalpia

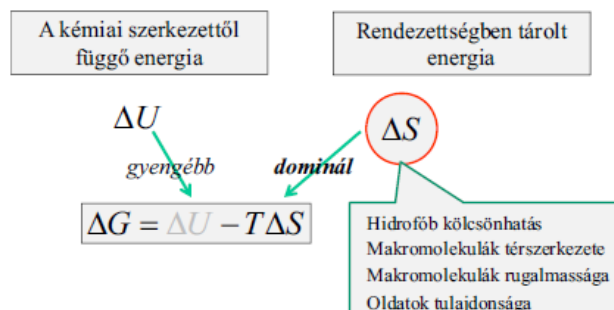
- az állandó p nyomású környezettel mechanikai kapcsolatban lévő termodinamikai test teljes H energiája. $H = U + E_h = U + pV$
- állandó nyomáson a rendszerrel közölt hő a rendszer entalpiaváltozásával egyenlő
- az entalpia a belső energia izobár körülmények között termikusan hasznosítható része
- zárt rendszerrel állandó nyomáson közölt, vagy abból elvont hő a rendszer entalpia-változásával egyenlő
 - A rendszerrel **közölt hő** az $H \uparrow$, a rendszerből **elvont** pedig $H \downarrow$.
- **Szabadenergia (F)**: izoterm körülmények között $dW_{\text{mech}} = dU - TdS$
 - Extenzív mennyiség
 - az anyag belső energiájának az izoterm munkavégzéssel hasznosítható része
 - az entrópia csak pozitív mennyiség lehet → **szabadenergia** $\downarrow$ ha $T \uparrow$ v. $V \uparrow$
 - A szabadenergia változása az adott állapotból az egyensúly eléréséig állandó térfogaton és hőmérsékleten megadja a rendszer által végezhető maximális munkát **←"szabad" energia elnevezés ebből jön**
 - **Irreverzibilis** munkatermelő folyamatokban a munkavégzés nagysága kisebb, mint a szabadenergia megváltozása **←csak olyan valósulhat meg, amely $\downarrow F$ -t**
 - **Reverzibilis** folyamatokban a szabadenergia változása teljesen munkavégzésre fordítható.
- **Szabadentalpia**: izoterm és izobár körülmények között (kémia, halmaz függő)
 - Állapot-fgv és extenzív
 - $G = H - TS$ [J] $dW_{\text{kém}} = d(H - TS)$
 - a belső energiának az izoterm, izobár folyamatokban hasznosítható része
 - $p = \text{Áll.}$ $G \downarrow$ ha $T \uparrow$: $G \downarrow$ mértéke az egyre nagyobbá váló S határozza meg.
 - $T = \text{Áll.}$ $G \uparrow$ ha $p \uparrow$: $G \uparrow$ mértéke attól függ, hogy a V mennyire függ a p-től
 - μ kémiai anyagmennyiség (nem lineáris a viselkedés)
 - $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S$
 - Változása reverzibilis, hasznos munka nélküli folyamatban
 - A szabadentalpia változása az adott állapotból az egyensúly eléréséig állandó nyomáson és hőmérsékleten megadja a rendszer által végezhető maximális munkát **←"szabad" entálpia elnevezés ebből jön**

$$\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S$$

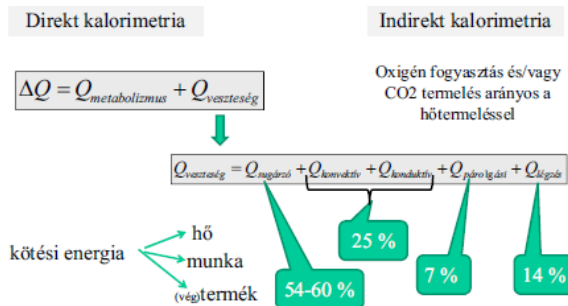
12. A biológiai belső energia

Megjegyzés [D.Ch3]: Nem értem!



13. A biológiai termikus energiaforgalom mérése

Megjegyzés [D.Ch4]: Előadás diákban még vannak klóépltetek



Direkt kalorimetria: biokaloriméter olyan berendezés: a takarmánnyal felvett energia; a szervezetből a bélsárral, a vizelettel, a bendő- és bélgázokkal, a sugárzással, a kilégzéssel és párolgással **távozó energia** pontosan megállapítható. ****egy tökéletesen szigetelt, hármalfalú kamra.**

- A belső és a középső fal között levegő van: a középső és a külső fal közötti vízköpeny vesz körül.
- A belső levegőréteget a vízköpenyben keringő víz hűtésével vagy fűtésével állandó hőmérsékleten tartják.
- A kamrát körülvevő levegőréteg hőmérsékletének szabályozása teszi lehetővé az állandó hőmérsékletet a biokaloriméterben.

Indirekt kalorimetria: a szervezetből távozó hő mérésének módjában különböznek egymástól.

- A termelt hő mennyiségét nem közvetlenül mérjük, hanem az O₂-felvétel, a termelt CO₂, a távozó metán, valamint a vizelettel ürített N ismeretében számítással állapítjuk meg.
- Az energiaforgalom indirekt mérése a N- és C-forgalom mérésén alapul

14. Kémiai és biokémiai reakciók hajtóereje

Kémiai folyamatok hajtóereje

- A termodinamika II. főtétele ad felvilágosítást az önként lejátszódó folyamatok irányára.
- A II. főtétele szerint elszigetelt rendszerben lejátszódó kémiai folyamatok során az entrópia növekszik $\Delta_r S = \sum_i \nu_i S_i > 0$
- A reakciószabadentalpia negatívját affinitásnak nevezzük ($A_r = -\Delta_r G$) és ezt tekintjük a az átalakulás hajtóerejének.
- a reakció során bekövetkező ún. *szabadentalpia*-csökkenés (ΔG), amely egy, a kötési energia változására utaló energiajellegű mennyiségnek, az entalpiaváltozásnak (ΔH) és egy, a rendszer rendezetlenségváltozására utaló mennyiségnek, az entrópiaváltozásnak (ΔS) a függvénye.
- A kémiai rendszerek minimális energiára és maximális rendezetlenségre törekednek, így ennek a két tényezőnek az eredőjéből adódik a reakció szabadentalpia változása.

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S = - R T \ln K$$

- Minél nagyobb a szabadentalpia-csökkenés, annál nagyobb a reakció egyensúlyi állandója (K), azaz az egyensúly annál nagyobb mértékben van a termékek felé eltolódva.
- A kémiai reakció végbemenetelének feltétele, hogy a reagáló molekulák megfelelő párosításban és viszonylagos térhelyzetben ütközzenek egymással és az így képződő *aktivált komplex* az adott hőmérsékleten az átlagos

Biokémiai folyamatok hajtóereje

- Enzimek

15. Csatolt kémiai reakciók hajtóereje

A spontán reakciók szabadenergiaváltozása részben felhasználható és/vagy más energiává alakítható. Az enzim, ami egy spontán reakciót kapcsolni tud egy nem-spontánnal, vagy mindkét reakciót katalizálja egyidejűleg, vagy egyiket sem.

→ $A + B \rightarrow C + D$ ($\Delta G < 0 \rightarrow$ **exergonikus**)

- Ha a reakció aktiválási energiája alacsony, **előre** halad.
- Ha a reakció aktiválási energiája magas, **katalízis** szükségeltetik.

→ $E + F \rightarrow G + H$ ($\Delta G > 0 \rightarrow$ **endergonikus**)

- Ha a reakció aktiválási energiája alacsony, **hátrafelé** halad.
- Ha a reakció aktiválási energiája magas, **katalizátor jelenlétében hátrafelé** halad.

Amikor két rendszer kapcsolt, gyakran előfordul, hogy az egyik rendszer $S_1 \downarrow$, $S_2 \uparrow$, $\Delta S > 0$.

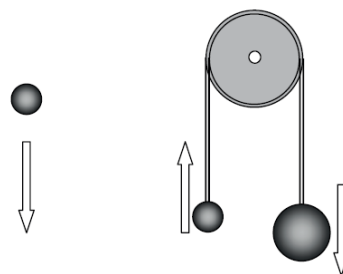
Mechanikai analógiával illusztrálhatjuk → → →

Minden magára hagyott test a nehézségi erő miatt a földre esik.

Ha a testet egy csigán keresztül egy nagyobb tömegű testtel kapcsoljuk, össze az felemelkedik.

A nagyobb tömegű test $\downarrow$ mozdul, miközben a csigán átvett huzal segítségével $\uparrow$ a kisebb tömegű testet.

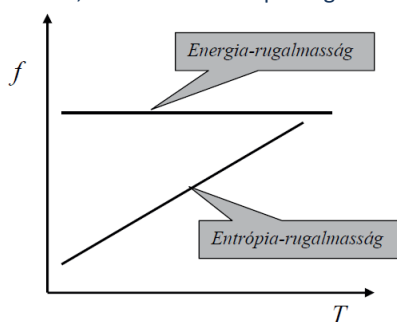
Ha külön nézzük a két testet, akkor a kisebb tömegű viselkedése értelmezhetetlen. **A kapcsolt rendszer mozgása természetes következménye a gravitációnak.**



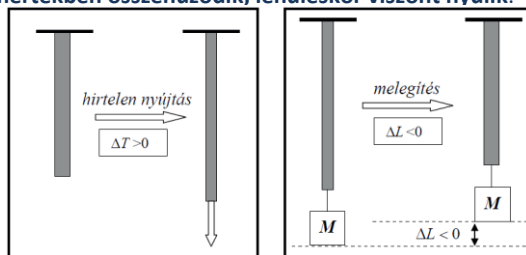
Termodinamikai szempontból kedvezőtlen reakció összekapcsolása egy kedvező kémiai reakcióval az átalakulás irányát megfordíthatja.

16. Entrópia és makromolekulák rugalmassága

Ha az állandó nagyságú deformáció fenntartásához szükséges erő a hőmérséklettel lineárisan változik, akkor tiszta entrópia-rugalmasságról beszélünk.



A megnyújtott gumiszalag melegítés hatására jelentős mértékben összehúzódik, lehűléskor viszont nyúlik.



→ Ha egy gumiszalag hirtelen húzzuk meg, akkor az felmelegszik: nem adunk neki időt a környezettel való hőcserére → **adiabatikus körülmények.**

- Minél nagyobb a deformáció, annál jobban felmelegszik
- Ez mutatja, hogy a nagy rugalmasságot mutató anyagok deformációja az ENTRÓPIÁVAL (S) kapcsolatos

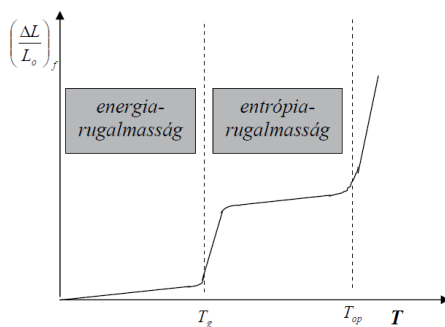
Megjegyzés [D.Ch5]: A hűtőszekrény működése látszólag ellentmondásban van a termodinamika II. főtételével, mivel az alacsonyabb hőmérsékletű térrész, ahelyett hogy melegedne, tovább hűl. A hűtőszekrény belsejében ezért az entrópia csökken. Ne felejtjük el azonban, hogy a második főtétel csak elszigetelt rendszerekre alkalmazható. A hűtőszekrény nem az. Ennek kompresszora melegíti a konyhát. Ha összegezzük a hűtőszekrény belsejében az entrópia csökkenést a konyha entrópiájának növekedésével, akkor az eredmény pozitív. A konyha entrópiája nagyobb mértékben növekszik, mint a hűtőben az entrópia csökken. Ebben az esetben a konyhát egy elszigetelt rendszernek tekinthetjük. A teljes rendszer entrópiája így – a második főtételnek megfelelően – növekszik.

- a rugalmas polimerszál deformációja termodinamikai szempontból hasonló a tökéletes gáz összenyomásához.

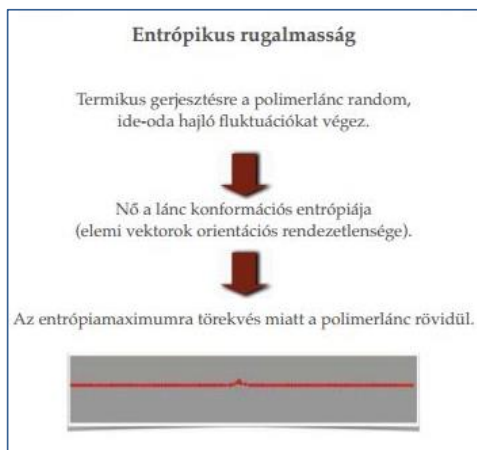
$$dU = fdL \rightarrow C_V dT = fdL$$

- a belső energia elsősorban a hőmérséklettől függ
- az egyenletből kiolvasható: adiabatikus nyújtásnál ($dL > 0$) a hőmérséklet nő ($dT > 0$) ← termikus S(hőhatással kapcsolatos) nem változik, csak a konfigurációs S(molekuláris szintű rendezetlenséggel kapcsolatos) változik,

- A teljes entrópia állandósága miatt ezt a csökkenést, a termikus entrópia ↑↑ kompenzálja, amely az adiabatikusan $T_{\text{megnyújtott gumi}}$ ↑↑ jár.
- A gumi és az ehhez hasonló tulajdonságokat mutató polimerek fizikai, valamint fizikai kémiai tulajdonságait a **láncok térszerkezetétől függő konfigurációs entrópia** határozza meg elsődlegesen.
- A rugalmas polimerek deformációját jellemző modulusz → $T \uparrow$ -vel lineárisan ↑, ami szintén az entrópia-rugalmasságot támasztja alá.
- A vázatomok közötti kötések **szabad rotációja** miatt → polimer nagyon sokféle térszerkezetet vehet fel ← **nagy a konfigurációs entrópiája**
- Ha a termikus energia már nem elég a rotáció biztosítására → a hajlékonyság megszűnik → entrópia nem változik tovább.
- az anyag merev és törékeny lesz. Deformációjára az energia-rugalmasság a jellemző.



$T_g \leq T \leq T_{\text{op=olv}}$ hőmérséklet tartományban lévő polimert **nagyrugalmas állapotúnak** nevezzük. Az $T_{\text{olv}} <$ már nem csak a polimer egységei, hanem maga az egész molekula megváltoztathatja a helyét. Az olvadt polimer folyékony lesz. A polimerláncok eltérő mozgásformái eltérő deformációs mechanizmussal párosulnak. Az T_g polimert energia-rugalmasság, míg a T polimert entrópia-rugalmasság jellemzi.



l = korrelációs hossz (hajlítómerevséget jellemzi)
 L = kontúrhossz

Merev lánc
 $l \gg L$
 Mikrotubulus

Szemiflexibilis lánc
 $l \sim L$
 Aktin filamentum

Flexibilis lánc
 $l \ll L$
 DNS molekula



17. Transzportfolyamatok általános jellemzése

→ Termodinamikai mennyiségek áramlása a transzportfolyamatok tárgykörébe tartozik

→ Azok a folyamatokat, amelyek során energia, anyag, töltés vagy valamilyen más extenzív jellegű mennyiség egyik helyről egy másik helyre jut el

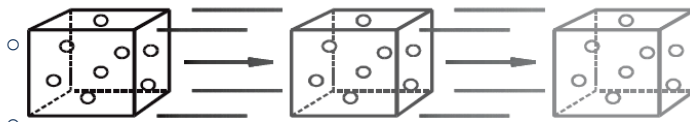
→ megjelenése mindig valamilyen hordozó mozgásával függ össze. Ilyen hordozók lehetnek:

- **részecskék** (atomok, molekulák, ionok): anyagot, **energiát**, **impulzust**, **töltést** hordozhatnak
- **elektronok**: **energiát**, **impulzust**, **töltést** hordozhatnak
- **fotonok**: **energiát** hordozhatnak

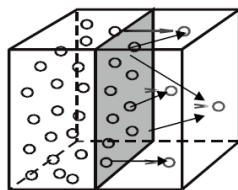
→ **jellemzésénél**: extenzív mennyiség árama (fluxus); az áramot létrehozó hatás; a termodinamikai hajtóerő

→ aszerint különböztethők: „együtt járnak-e makroszkopikus mozgással vagy sem”

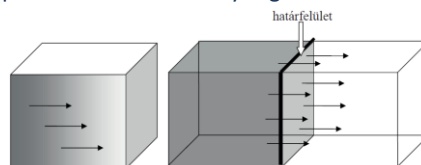
- áramlásos (konvektív) transzportfolyamat



- vezetékes (konduktív) transzportfolyamat,

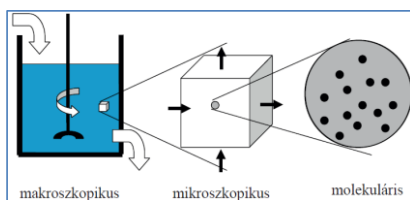


→ átadási transzport: az extenzív mennyiségek határfelületen keresztül áramlanak



Vezetékes transzport

átadási transzport



← Transzportfolyamatok leírásának három szintje

A transzportfolyamatok általános termodinamikai

leírása után részletesen → diffúzió → belső energia

→ hővezetés → áramlási tulajdonságok

(impulzustranszport alapján).

18. A diffúzió törvényei

Diffúzió az a nyugvó rendszerben lejátszódó vezetékes anyagtranszportot nevezzük, amely során kémiai potenciál gradiens (koncentráció gradiens) hatására komponensáram jön létre.

FICK I. TRV:

$$J_v = -D \cdot \frac{\Delta c}{\Delta x}$$

D: diff. állandó [m^2/s]

$\Delta c/\Delta x$: koncentráció gradiens

Stacionárius Diffúzió: diffúzió folyamatát írja le elemi mechanizmusból kiindulva

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r}$$

ahol r : a részecske sugara
 η : a közeg viszkozitása
 T : a közeg hőmérséklete

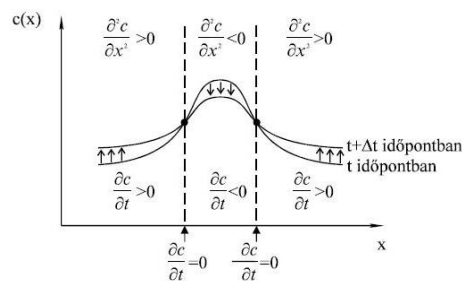
- a diffúzió anyagáram a koncentráció térbeli változásának a meredekségével arányos
- a diffúziós áram mindig a csökkenő koncentráció irányába folyik
- a D diffúziós együttható értéke mindig pozitív

$$D \Delta t \frac{\Delta \left(\frac{\Delta c}{\Delta x} \right)}{\Delta x} + c(t) = c(t + \Delta t)$$

FICK II. TRV:

Amennyiben a koncentráció (térbeli) eloszlását ismerjük egy adott t időpontban $[c(x, t)]$, akkor meghatározható egy kicsit későbbi $t + \Delta t$ időpontban az új eloszlás.

- ahol a $c(x)$ függvény görbülete pozitív („felülről” homorú), a koncentráció az idővel nő
- ahol a $c(x)$ függvény görbülete negatív (domború), ott a koncentráció csökken,
- ahol a $c(x)$ függvénynek inflexiós pontja van, a görbület zérus, a koncentráció időben nem változik

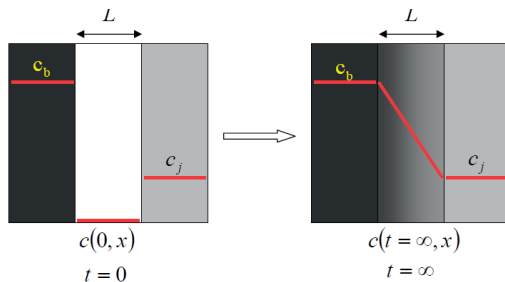


12.2.3. ábra: A koncentráció eloszlás két időpontban.

19. Stacionárius és nem-stacionárius diffúzió

- A stacionárius állapot időtől független, nem egyensúlyi állapotot jelent $\frac{\partial c(r, t)}{\partial t} = 0$

Ha a membrán átgátható mind az oldószerre, mind pedig az adott anyagra nézve, akkor megindul az oldott anyag diffúziója a baloldaltól a jobb oldal irányába. $c_b > c_j$

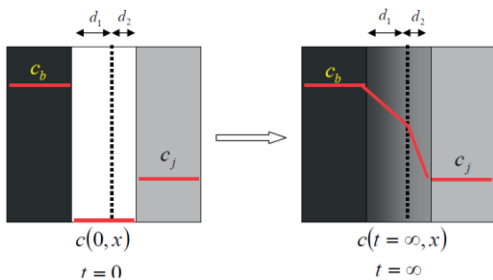


Ha c_j nem 0: kezdetben mindkét oldatból megindul a diffúzió a membrán közepe felé. Stacionárius: koncentráció eloszlását Fick II. egyenlet megoldása szolgáltatja koncentráció eloszlás nem függ az időtől: → Fick II=0 bal és jobb oldala bármely $0 < x < L$ estén.

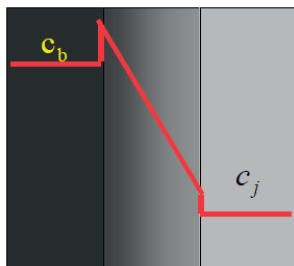
Membránban kialakuló koncentráció profil LINEÁRIS

$$0 = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \text{ mivel } D \neq 0 \rightarrow 0 = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \text{ tehát első derivált } m \text{ konstans} \rightarrow c(x) = mx + b = -\frac{c_b - c_j}{L}x + c_b$$

- Fick II. törvénye alapján: amennyiben a diffúziós együttható nem függ a koncentrációtól, **egyirányú stacionárius diffúzió** esetén a koncentráció a hely függvényében lineárisan változik.
- A stacionárius diffúzió feltételéből az is következik, hogy a **komponensáram-sűrűség nem változik** a hely függvényében → a diffúziós együtthatót egyszerű kísérleti elrendezéssel meghatározzuk. (ez esetben az áramsűrűség azonos lesz)



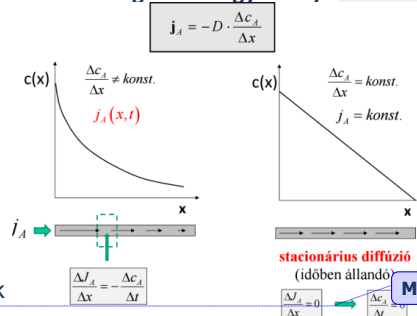
A koncentrációk meredeksége és a diffúziós együtthatók fordítottan arányosak. A kisebb áteresztő képességű membránban nagyobb gradiens alakul ki.



← amikor a membrán és az oldatfázis között **megoszlási egyensúly** alakul ki.

$$\frac{\Delta J_A}{\Delta x} = - \frac{\Delta c_A}{\Delta t}$$

$$\frac{\Delta J_A}{\Delta x} = 0 \Rightarrow \frac{\Delta c_A}{\Delta t} = 0$$

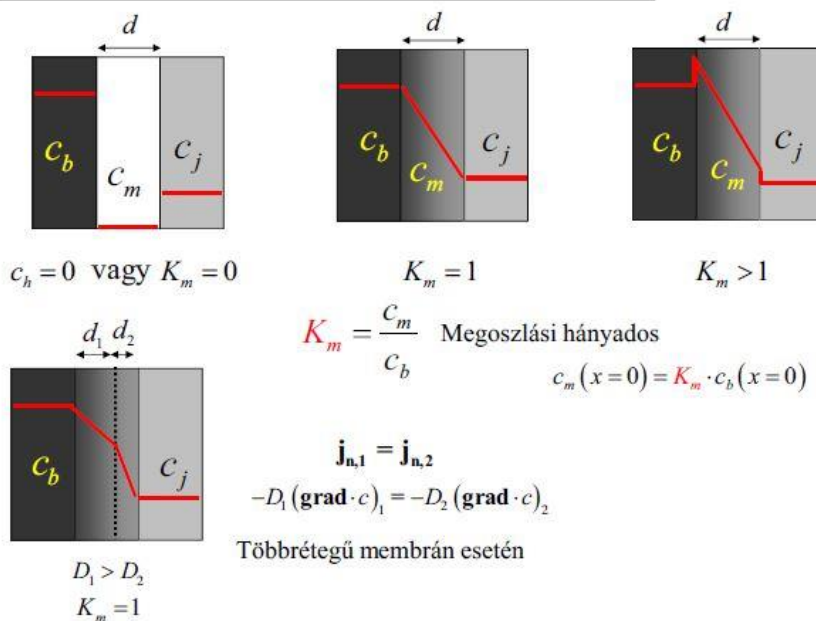


→ **Nem-stacionárius:** a koncentráció időben és térben változik

Megjegyzés [D.Ch6]: hiányos

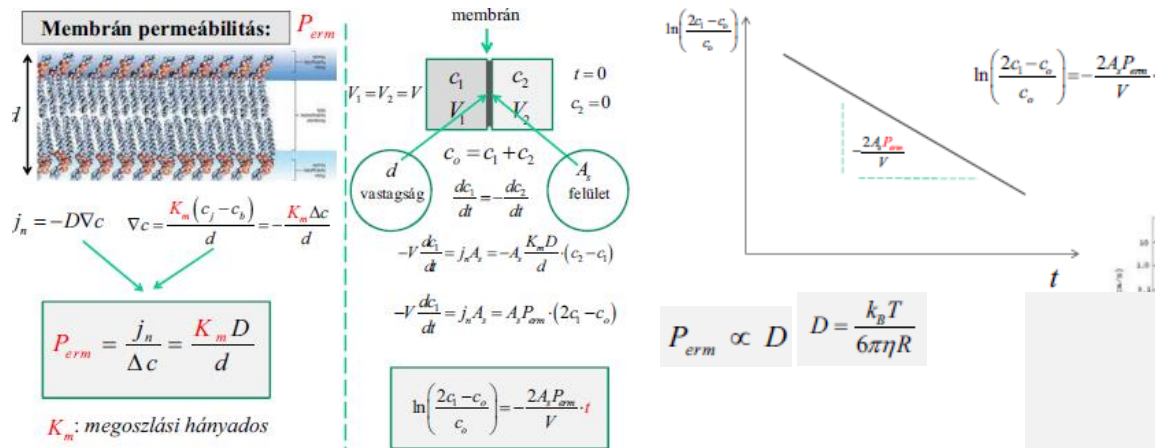
20. Megoszlás és diffúzió

Koncentráció eloszlás stacionárius diffúziósnál



21. Membrán permeabilitás

- Az egységnyi koncentrációkülönbségre vonatkozó áramsűrűséget a membrán permeabilitásának nevezzük $P_{erm} = \frac{j_n}{\Delta c} = \frac{D}{L}$
- A permeabilitás a diffúziós együtthatónak és a membrán vastagságának a hányadosa



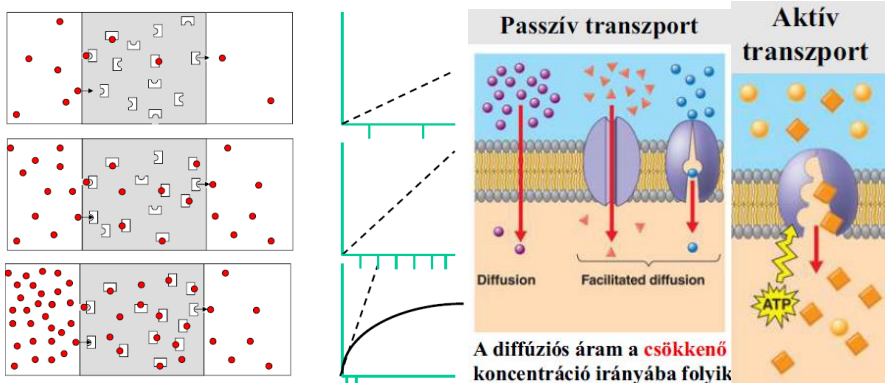
22. Közvetített diffúzió

Carrier-fehérjék által közvetített diffúzió.

- carrier-fehérjék nem képeznek csatornát, hanem a **transzportálandó anyagot megkötik, konformációváltozást** szenvednek → membrán másik oldalán leadják.
- UNIPORTER: egyetlen anyagot transzportál, pl. glukóz transzporter
- KONTRASZTPORTER: ion / molekula **aktív transzportja** → másik anyag **passzív transzportjával** van összekötve. A két részecske szállítása történhet egyirányban / ellentétes irányban

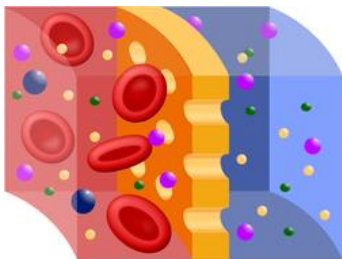
Fehérjecsatornák által közvetített diffúzió.

- transzmembrán fehérjék által kialakított **csatornák végzik**
- nyitott állapotban: a transzport rendkívül gyors és általában szelektív
- **ioncsatornák**: sejtek ingerlékenységének, egyéb folyamatainak szabályozásában.



23. Ozmózis

- Két eltérő összetételű oldatot olyan féligáteresztő hártyával (szemipermeabilis membránnal) választunk el, amely az **oldószer-molekulák** számára **átjárható**, de az **oldott anyag** molekuláit **nem engedi át**.
- Koncentrációk eltérők: a két oldat nincs egyensúlyban.
- A termodinamikai egyensúlyra való törekvés $\Delta c \downarrow$ re irányul.
 - **oldott anyag molekulái** diffúzió révén átmennek a hígabb oldatfázisba $\leftarrow$ féligáteresztő hártya megakadályozza
 - a hígabb oldatból oldószer $\rightarrow$ töményebbe: $\Delta c \downarrow$
 - oldószer-molekulák töményebb fázisba történő transzportja $\uparrow \uparrow$ -li a töményebb oldat V-át $\leftarrow \leftarrow$ féligáteresztő hártya mindkét felén kezdetben azonos magasságú folyadék közt megbomlik a hidrosztatikai egyensúly.
 - **töményebb** oldat szintje fokozatosan $\uparrow$; a **hígabbé** $\downarrow$
 - oldószer molekulák töményebb oldatba történő átmenetelével az oldószer **két térfél közti kémiai potenciáljának a különbsége** $\downarrow$
 - A két folyadékfelszín közötti Δh nagyságú szintkülönbség fokozatosan $\uparrow$
 - A termodinamikai egyensúly akkor áll be, amikor az oldószer-molekulákat a töményebb oldatfázis irányába terelő **π ozmózisnyomás** = p_{hidroszt} éppen megegyezik a vele ellentétes irányban ható, a megemelkedett folyadékszint miatt kialakuló Δh magasságú folyadék hidrosztatikai nyomásával
- Az oldatokban az oldott anyagok a teljes térfogatban igyekeznek a teret homogénen betölteni (mint gázok). Ha nincs akadály: diffúzió útján. Inhomogén / heterogén önként olyan folyamatok játszódnak le, amelyek az oldatokban és a gázokban is a komponensek egyenletes eloszláshoz vezethetnek



$\leftarrow$ A féligáteresztő, sárga színű membránon csak a kisebb méretű részecskék juthatnak át

24. A diffundáló részecskék mozgásának számítógépes modellezése

BROWN-mozgás:

- A kinetikus elmélet szerint a gázmolekulák két ütközés között szabadon mozognak átlagsebességgel. Folyadékban a molekulák jóval lassabbak: folyton ütköznek a szomszédjaikkal: egyenes-vonalú pályájuk megtörik $\leftarrow$ zig-zugos pályát követnek $\leftarrow T \uparrow$ élénkül
- Mikroszkóp alatt is megfigyelhető, ha részecske mérete a μm tartományban van.
- A Brown-mozgás a molekulák hőmozgásának közvetett bizonyítéka, ugyanis a μm nagyságrendű részecskék mikroszkóp alatt látható mozgását a közeg molekuláival való **sorozatos és véletlenszerű ütközések** váltják ki. A diffúzió mikroszkopikus elméletét a Brown-mozgás elmélete jelenti.

PC MODELLEZÉS: Tisztán elméleti fogalmakkal (modell; egyenletek, stb.) operál.

- Szimuláció során a kutató a számítógépben szimulált modell paramétereit, és tanulmányozza a változó rendszer viselkedését változtatja
 - Fokozatosan növelni (csökkenteni) a hőmérsékletnek, térfogatnak, nyomásnak, stb. megfelelő paraméterek értékét, és ki lehet számolni olyan mennyiségeket, amelyeket a kísérletekben általában mérnek.

25. A hősugárzás és hővezetés

Hősugárzás az energia térbeli terjedésének elektromágneses hullámok formájában megvalósuló folyamata, ami közvetítő közeg szükségessége nélkül mechanizmus

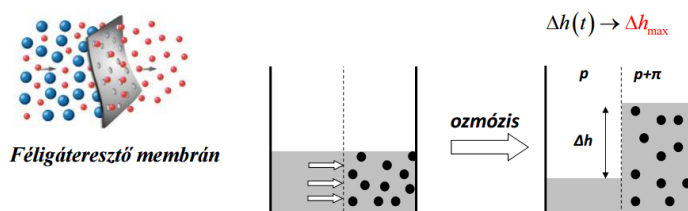
- a hő → elektromágneses sugárzássá majd a tér egy másik pontján az elektromágneses sugárzás → hővé alakul

Hővezetés az energia térbeli terjedésének az a formája, amikor a **hő** egy közeg egyik ($\uparrow\uparrow T$ -ű) részéből annak másik része felé történő "áramlása" során a közeget alkotó részecskék elmozdulása nem számottevő, illetve rendezetlen.

- mechanizmusa a különböző közegek esetében azonban lényegesen különbözik egymástól
 - **Gázokban** az atomok, molekulák rendezetlen mozgása miatti ütközéseknek (és a diffúzió) következtében terjed az energia.
 - **Fémekben** a hő két párhuzamos, majdnem független mechanizmus révén terjed, egyrészt a kristály rácsot alkotó atomok rezgése által, másrészt a szabad elektronok diffúziója révén.
 - **Nem fémes anyagok és folyadékok** esetén az energia terjedése rugalmas elemi hullámok révén valósul meg.

26. A konduktív hővezetés törvényei

Konvektív és konduktív anyagtranszport: **ozmózis**



Termodinamikai egyensúlyban

$$\Delta\mu_1(x_2) = -\pi V_1$$

Híg oldat

$$\pi_{id}(x_2) = \frac{RT}{V_1} x_2$$

$$\pi_{id} = \frac{RT}{M_2} c_2$$

$$\Delta\mu_1 = RT \ln x_1 = RT \ln(1 - x_2) \cong -RTx_2 - \frac{RT}{2} x_2^2$$

27. Biológiai hőtranszport

A hőtranszport témakörébe tartozó folyamatokat az alábbi négy csoportba foglalhatjuk össze: (A hőtranszport összetett folyamat, többféle mechanizmus eredője lehet)

- Hővezetés
- Hőátadás
- Anyagárammal vitt hőtranszport
- Hősugárzás

O₂ transzportja a vér és a szövetek között ← Többlépcsős transzportfolyamat

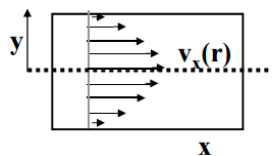
- Légzéssel **konvektív** transzport a tüdőbe
 - **Konduktív** transzport a kapillárisokon át a vörösvértestekhez
 - O₂ **megkötődik** a vörösvértestek hemoglobinján
 - **Konvektív** mozgás a vérkeringésben
 - A szöveteknél **konduktív** transzport a mitokondriumokhoz
- → ATP

Testhőmérséklet szabályozás: Konvektív: télen

Testen belüli: test és vér közötti hővezetés

Hővesztesség párolgással: → légzés → izzadás

28. A reológia alapösszefüggése



$$j_i = -\eta \frac{\Delta v_x}{\Delta y}$$

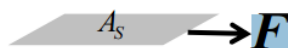


$$\tau = \eta \frac{\Delta v_x}{\Delta y}$$

Kapcsolat a nyírófeszültség és a sebesség gradiens között:

Nyírófeszültség:

$$\tau = \frac{F}{A_s}$$



Sebesség gradiens:

$$G = \frac{\Delta v_x}{\Delta y} = \frac{\Delta v_x}{r}$$

A reológia tudománya az **anyagok folyási tulajdonságainak** vizsgálatával foglalkozik

Axiomái:

- Az izotróp erő hatása reverzibilis mindaddig, amíg kémiai, vagy szerkezeti változás nem történik
- Az alakváltozások összetettek; elemi alakváltozások szuperpozíciói (Boltzmann-féle szuperpozíciós elv)
- A rendszert leíró változók értékének zérussá válása esetén az egyenletek egyszerűbb reológiai rendszerek egyenleteivé degradálódnak

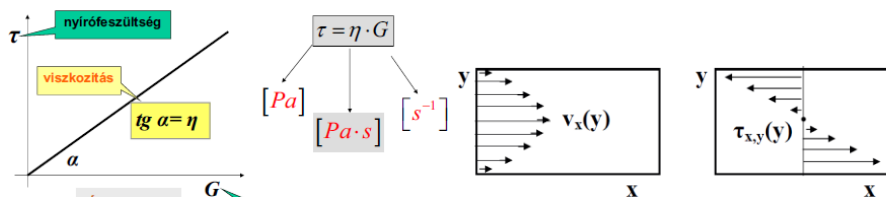
A reológia három alapvető modell segítségével írja le az anyagok tulajdonságait:

- elasztikus (Hooke-test) viszkózus (Newton-test) plasztikus (Saint-Venant-test)

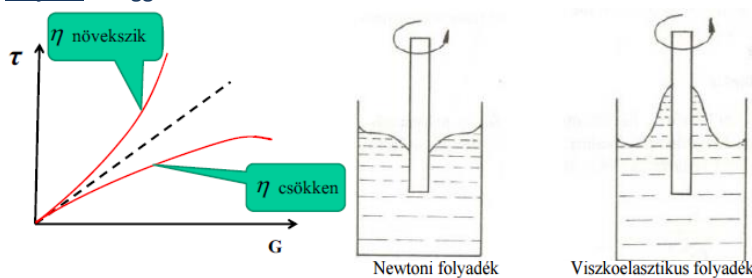
29. Newtoni- és nem-newtoni folyadékok folyásgörbéi

Newtoni: a nyírási feszültség (τ) arányos a sebesség gradienssel, amely merőleges a nyírási síkra

- A deformáció sebesség megegyezik a sebesség gradienssel $\tau = \eta \frac{dv_x}{dy}$
- A deformáció sebesség és a nyíróerő között lineáris kapcsolat áll fenn.
- **A newton féle viszkozitási törvény:** lamináris áramlás esetén az egyes rétegek között, a belső súrlódás miatt ébredő nyíróerők és az áramlási sebességprofil szoros kapcsolatban állnak egymással.



Nem Newtoni: viszkozitás nagysága az anyagi minőségen kívül a deformáció hatás mértékétől és idejétől is függ.



30. Az áramlás típusai

Az áramló közeget jellemzi a közeg sebessége, és az adott keresztmetszeten időegység alatt átáramló mennyiség

Lamináris: a közeg rétegesen áramlik, mintha végtelen számú koncentrikus cső mozogna

- a részecskék mozgási iránya áramlással //, áramlás irányára ~~merőleges~~ összetevő nincs
- különböző **rétegek sebessége** az áramlás határához mért távolságtól függően **különböző lehet**.

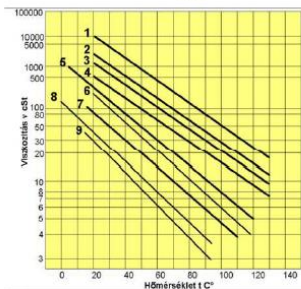
Turbulens: áramlás irányára van merőleges sebességkomponens is.

- csak egy bizonyos sebesség fölött jönnek létre örvények a vezetékben. Az áramlások hasonlóságának mérőszámként vezették be a Reynolds-számot, ami segít megítélni, hogy a szóban forgó áramlás lamináris-e.

31. A viszkozitás

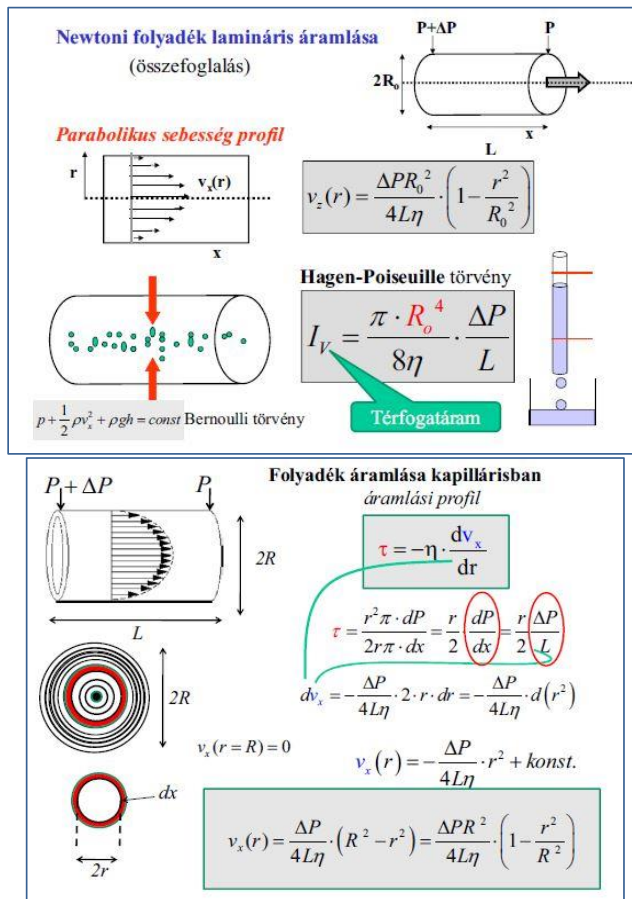
Más elnevezéssel a **belső súrlódás** egy gáz vagy folyadék (fluidum) belső ellenállásának mértéke a csúsztató feszültséggel szemben. Így a víz folyékonyabb, kisebb a viszkozitása, míg az étolaj vagy a méz kevésbé folyékony, nagyobb a viszkozitása.

A viszkozitása függése a hőmérséklettől:



$$\eta(T) = \eta_o \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right)$$

32. Az áramlási profil és a térfogatáram kapcsolata az áramlást előidéző nyomáskülönbséggel



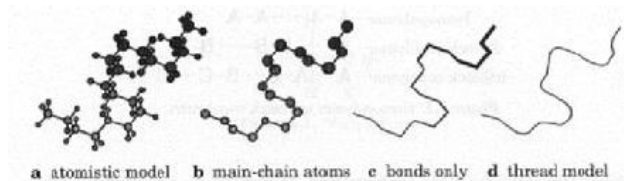
33. Az élő- és élettelen anyag legjellegzetesebb különbségei

Élő anyag (rendszer), amely vegetatív (önfenntartó) és szaporító (önreprodukáló) jelenségeket mutat.

Technikai anyag ↔ Élő anyag

monolit	hierarchikus	építkezés(kompozit)	izom
állandóság	folytonos megújulás	váza	sejt újulás
korrózió, károsodás	öngyógyulás	fém	seb
passzív	alkalmazkodó képesség	beparkolt kocsi	napraforgó
mémőki struktúrák	önszerveződő struktúrák	Eiffel tower	fehérjék
elektronok	ionok	elektronika	idegek
változatos energiaforrások	ATP	benzin	glukóz
termikusan ellenálló	hőmérséklet érzékeny	kályha	téli ruházat
folyamatos energia ellátás	szakaszos energia ellátás	Benzin	étel (van tárolás)
KÉMIAI SZERKEZET TULAJDONSÁG FELHASZNÁLÁS	KÉMIAI SZERKEZET TULAJDONSÁG FUNKCIÓ		

34. Hajlékonyláncú makromolekulák térszerkezete



- A térszerkezet leírását valamelyest egyszerűbbé teszi az a tény, hogy a legtöbb polimerben a vázatomokat összetartó kötések állandó hosszúságú merev egységeknek tekinthetők.
- Megadjuk az első vázatom térbeli helyzetét, a kötéshosszt, a vegyértékszöveget, valamint az egyes kúpok tengelye körüli szögelfordulást minden további vázatomra. A makromolekula globális térszerkezete nagymértékben függ attól, hogy az egyes kötésekre milyen szögelfordulás értékek jellemzők.

Hajlékony láncú polimereknél a polimerlánc **vázatomjainak rotációja miatt** a makromolekula folyton változó, szabálytalan térszerkezetű gombolyag alakot vesz fel ← **a lánc kontúrvonalán távoli monomer egységek térben közel kerülhetnek egy-máshoz.**

A konformációs energia meghatározásához:

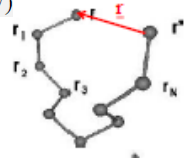
RENDEZETT, NEM RENDEZETT

- a szomszédos monomer egységek ún. **rövid hatótávolságú** (rövid távú)
- a lánc hajlékonysága miatt térben közel kerülő, a lánc vázán mérve azonban távol levő egységek ún. **hosszú hatótávolságú** (hosszútávú) kölcsönhatását is figyelembe kell venni.
- Ez a polimerlánc összes atomja és atomcsoportja közti kölcsönhatás egyidejű leírását igényelné.

A **merev és szabálytalan** térszerkezetű (hosszútávú rend nélküli) molekulák okozzák az **üvegállapotú polimerek törékenységet**. A gumi és a gumszerű anyagok **rugalmas** tulajdonsága molekuláik rendezetlen és igen **labilis** térszerkezetének következménye. Polimeroldatok fizikai kémiai tulajdonságait is döntő módon a molekulák hajlékonysága (térszerkezetük **labilitása**) határozza meg.

35. Hajlékonyláncú makromolekulák térszerkezetének számítógépes modellezése

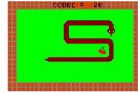
önelkerülő bolyongás
self avoiding walk (SAW)



$$\vec{r} = \sum_{i=1}^{N_s} \vec{r}_i$$

bolyongás
random walk (RW)

$$R_0 = a_s N_s^{1/2}$$

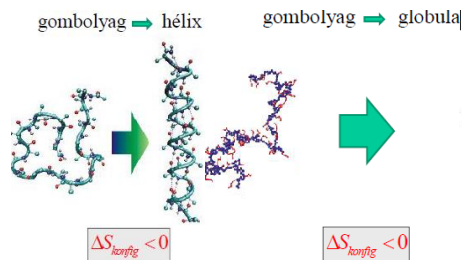


BROWN-mozgás:

- A kinetikus elmélet szerint a gázmolekulák két ütközés között szabadon mozognak átlagsebességgel. Folyadékban a molekulák jóval lassabbak: folyton ütköznek a szomszédjaikkal: egyenes-vonalú pályájuk megtörik ← zög-zugos pályát követnek ← ↑ élénkül
- Mikroszkóp alatt is megfigyelhető, ha részecske mérete a μm tartományban van.
- A Brown-mozgás a molekulák hőmozgásának közvetett bizonyítéka, ugyanis a μm nagyságrendű részecskék mikroszkóp alatt látható mozgását a közeg molekuláival való **sorozatos** és **véletlenszerű ütközések** váltják ki. A diffúzió mikroszkopikus elméletét a Brown-mozgás elmélete jelenti.

36. Makromolekulák rendezett térszerkezetei

- Makromolekulák szerkezetét kialakító kémiai kötések minden tekintetben egyenértékűek a kismolekulájú anyagok hasonló kémiai környezetben lévő kötéseivel.
- Valamennyi elem közül a szén az egyetlen, amelynek atomjai korlátlan számban kapcsolódhatnak közvetlenül egymással, a létrejövő molekulák stabilitásának csökkenése nélkül.
- Teflon hélix; Izotaktikus szerkezetek hélicei
 - periodikusan ismétlődő lokális konformációk:
 - zárt gyűrű, cikcakk, vagy hélix ← mindegyik egy globális konformációnak felel meg



hajtóerő
 $\Delta G < 0$

A konformációs entrópia csökken!

$\Delta G_{konf} = \Delta H_{konf} - T \Delta S_{konf}$ $\Delta H_{konf} \leq 0$ $\Delta S_{konf} \square 0$ $\Delta G_{konf} > 0$?

$\Delta G_{tot} = \Delta G_{konf} + \Delta G_{water}$ Hidrofób kölcsönhatás

37. Gélek típusai

Gélek: Átmenet a szilárd testek és a folyadékok között

Nincs még egy olyan anyag, amely oly sokféleképpen képes reagálni a környezeti változásokra, mint a polimer gél

környezeti változás	válasz reakció	Fizikai gél képződése:
<i>hőmérséklet, összetétel, pH, specifikus ionok, felületaktív anyagok, electromos tér, mágneses tér.</i>	<i>térfogat változás és az ettől függő tulajdonságok (optikai, mechanikai, termodinamikai, transport and kinetikai)</i>	*kristályosodás *helix képződés *H-híd kötés *Coulomb kölcsönhatás
		<u>Kémia gél képződése:</u> *térhálósítás *térhálósító polimerizáció
		<u>GÉLESEDÉS:</u> Viszkózitás: végtelen gélpontban Modulusz: ↑ a gélpontban

→ A zselatinpor maga is gél, de ún. xerogél, mert kiszáradt, víztartalmát jelentős mértékben elvesztette. Ha vízzel érintkezik, a vízmolekulák bediffundálnak a xerogélbe, ezáltal ez megduzzad, és lassan kocsonyás liogéllé alakul.

Típusai:

Liogélekre jellemző a **magas folyadéktartalom**. A xerogélek ← liogélek kiszáradásával keletkeznek.

Hagyományos aerogélek szilárd részecskék gázfázisbeli összekapcsolódása révén jönnek létre.

A szilika aerogélek (pl. Cab-O-Sil M5) rendkívül kis sűrűségű, könnyen szálló fehér porok, az 5- 10 nm-es szilícium-oxid szemcsék H-kötések kialakulása folytán füzérszerűen összekapcsolódnak: sűrítőszerke.

Makromolekulás gél (fehérje): kocsonya,

Micella gél: szappandarabka.

Mikrofázis gél: bármely analitikai csapadék gélje: króm-hidroxid gél.

Fizikai gélek: a gélből újra szol (kolloid) létesíthető a hőmérséklet emelésével (a Brownmozgás energiája ↑) v. mechanikai (nyíró) behatásra (tixotrópia), akkor reverzibilis gélekről beszélünk ← másodrendű (fizikai) kötések tartják össze a részecskéket ← **kocsonya, szappan-gél**

A tojásfehérje sütésével azonban irreverzibilis (kémiai) gél keletkezik, ugyanis a fehérjemolekulák között elsőrendű kémiai kötések (pl. kénhidak) létesülnek ← irreverzibilis

38. Fizikai és kémiai gélek jellegzetes tulajdonságai

Átmenet a szilárd testek és a folyadékok között.

Főbb jellegzetességek: **3D szerkezet **nagy mennyiségű fluid fázis

Termikus stabilitás alapján:

- termoreverzibilis (fizikai)
- permanens (kémiai)

Gélesedés:

viszkózitás - végtelen a gélpontnál

modulusz - növekszik a gélponttól

oldat → gél pont → szilárdtest

Fizikai gél képződése:

- kristályosodás
- hélix képződés
- H-híd kötés
- Coulomb kölcsönhatás

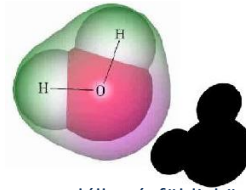
Kémiai gél képződése:

- térhálósítás
- térhálósító polimerizáció

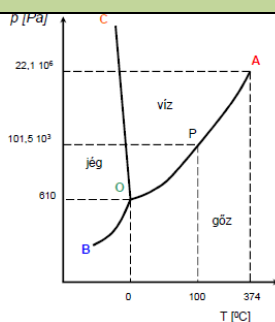
39. A víz különleges tulajdonságai

„minden dolgok forrása”

- Minden szervezet alapvető anyaga a víz.
- Föld: 71% víz, 70% édesvíz: jég/hó
- Egyetlen olyan anyag, amelynek mindhárom halmazállapota megtalálható földi körülmények között (hőmérséklet és nyomás).



→ A víz moláris térfogata 4 °C-on minimális, sűrűsége pedig maximális

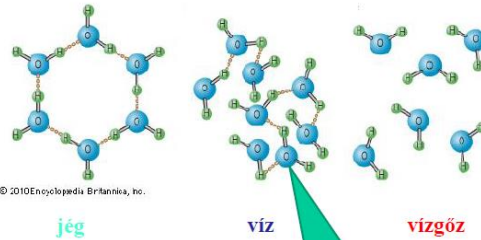


A víz kivételével, a legtöbb anyag moláris térfogata a kristályos fázisban kisebb, mint az olvadékban. ← Moláris térfogata 8%-al ↓ olvadáskor ←← p ↑ olvadást segíti elő

Ha a víz hasonlóan viselkedne a többi anyaghoz, akkor:

- nem lennének hegyi patakjaink,
- a jég lesüllyedne a vízben,

- folyók teljes egészében befagynának



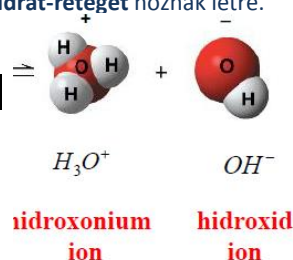
A folyékony víz **hőkapacitása** jóval nagyobb, mint a többi folyadéké, de nagyobb a szilárdtestek és a gázok hőkapacitásánál is ← víz molekulái között kialakuló számtalan H-híd kölcsönhatás következménye

- A jég hőkapacitása enyhén növekszik az olvadáspontig → ezen túl a folyékony víz megjelenésével a hőkapacitás nagymértékben megnő.
- A további hőmérsékletnövelés csak viszonylag kismértékű hőkapacitás növekedést idéz elő.
- A vízgőz hőkapacitása kisebb, mint a folyékony vízé.
- A víz nagy párolgáshője miatt egységnyi térfogatban több energiát tárol, mint a többi „normális” folyadék.
- Kedveli a poláros felületeket (kapilláris emelkedés). Nem kedveli az apoláros felületeket (teflon)
 - Nagy felületi feszültség: jól tükrözi a molekuláris kölcsönhatások erősségét
- Jó oldószer → hézagos vízszerkezet miatt → jól elegyedik poláros molekulákkal
 - A nagy dielektromos állandójú víz az ionok kölcsönhatásának energiáját több mint 80-ad részére ↓↓. Ez a **nagymértékű energia ↓↓ felelős a víz kiváló oldó hatásáért.**
- Hidratáció: a vízmolekulák az ionok körül rendezett szerkezetű **hidrát-réteget** hoznak létre.

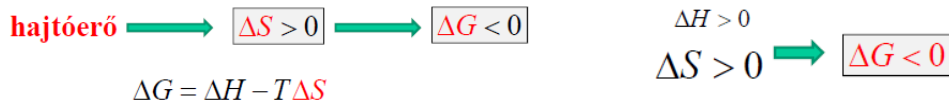
Szerepe az életfolyamatokban:

Hatékony hűtőfolyadék a hőmérséklet szabályozásban (izzadás)

A metabolikus hő hőmérséklet növelésének csökkentése



Hidrofób kölcsönhatás: apoláros molekulák oldása vízben



40. Izotóniás, hipotóniás, hipertóniás oldatok

Az izotóniás oldat koncentrációja megegyezik a sejtekben lévő koncentrációval, a hipotóniásé kisebb, a hipertóniásé nagyobb. Ezáltal a hipotóniás oldatból a víz a sejtekbe diffundál, a hipertóniás oldatból pedig a sejtekből a víz kiáramlik, hogy a koncentráció kiegyenlítődjön.

- Izotóniás oldat: ozmózis nyomása a sejten belüli ozmózis nyomással azonos
 - o emberben ez 0,9%-os NaCl-oldat koncentrációjának felel meg
- Hipotóniás oldat: ozmózis nyomása egy másik oldat ozmózis nyomásához viszonyítva **kisebb**
 - o a tiszta víz a cukoroldathoz képest
- Hipertóniás oldat: egy másik oldathoz viszonyított ozmózis nyomása **nagyobb**
 - o az édesvízhez viszonyítva a tengervíz

41. Termodinamikai egyensúly feltétele és az önként lejátszódó folyamatok iránya

A 0. Főtétel kimondja, hogy a termodinamikai egyensúly feltétele a megfelelő intenzitásparaméterek értékének egyenlősége, tehát egy egykomponensű két fázisú termodinamikai rendszer fázisegyensúlyának feltétele, hogy: $T_1=T_2$ és $p_1=p_2$ és $\mu_1=\mu_2$

- A fázisegyensúly szükséges feltétele, hogy az egyensúly az egyes fázisokon belül is kialakuljon. $\mu_1(p,T)=\mu_2(p,T)$
- Az egyensúlyi állapot kialakításának feltételei:

1. Termikus egyensúly: a hőmérséklet a rendszer minden pontjában azonos.
2. Mechanikai egyensúly: a nyomás a rendszer minden pontjában azonos.
3. Fázisegyensúly: a fázisok mennyisége és összetétele a rendszeren belül állandó.
4. Kémiai egyensúly: a komponensek mennyisége állandó, a kémiai potenciálok értéke a rendszeren belül azonos.

Gyakorlati tételek

1. Rezonancia
2. A szem optikája
3. Coulter-számláló
4. Audiometria
5. EKG
6. Bőrimpedancia
7. Röntgen-cső, emissziós spektrumok, abszorpció, Röntgen-CT
8. Diffúzió