

Milyen szerepet játszik a szövetek akusztikus impedanciája az ultrahang-diagnosztikában?





SEMMELWEIS EGYETEM

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet,
Nanokémiai Kutatócsoport



Biológiai rendszerek különleges komponensei, a víz és a makromolekulák

Zrínyi Miklós

egyetemi tanár, akadémikus

mikloszrinyi@gmail.com

http://real.mtak.hu/30641/1/Fizikai_kemia_e-book.pdf

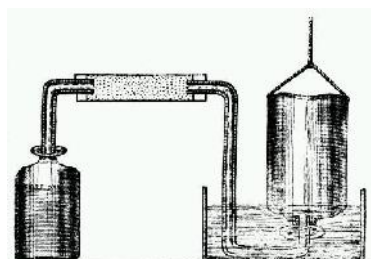
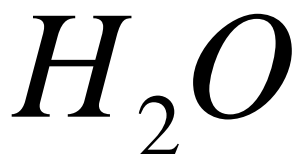
Jedlovsky-Hajdú Angéla

Egy különleges folyadék: a **víz**



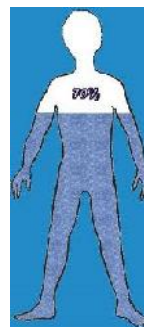
Thales már Krisztus előtt 580-ban felismerte, hogy a víz
„minden dolgok forrása”.

Kémiai összetételét először az angol Henry Cavendish
határozta meg 1783-ban.



A Föld felszínének 71%-át víz borítja, ez főleg sós víz. Az édesvíz 70%-a hó és jég formájában tárolódik.

Minden szervezet alapvető anyaga a víz. A medúzának még 98%-a, a három hónapos magzatnak 94%-a, az újszülöttnak még 72%-a, a felnőtt embernek 50-60%-a víz. Az életkor előrehaladtával a víz aránya csökken.

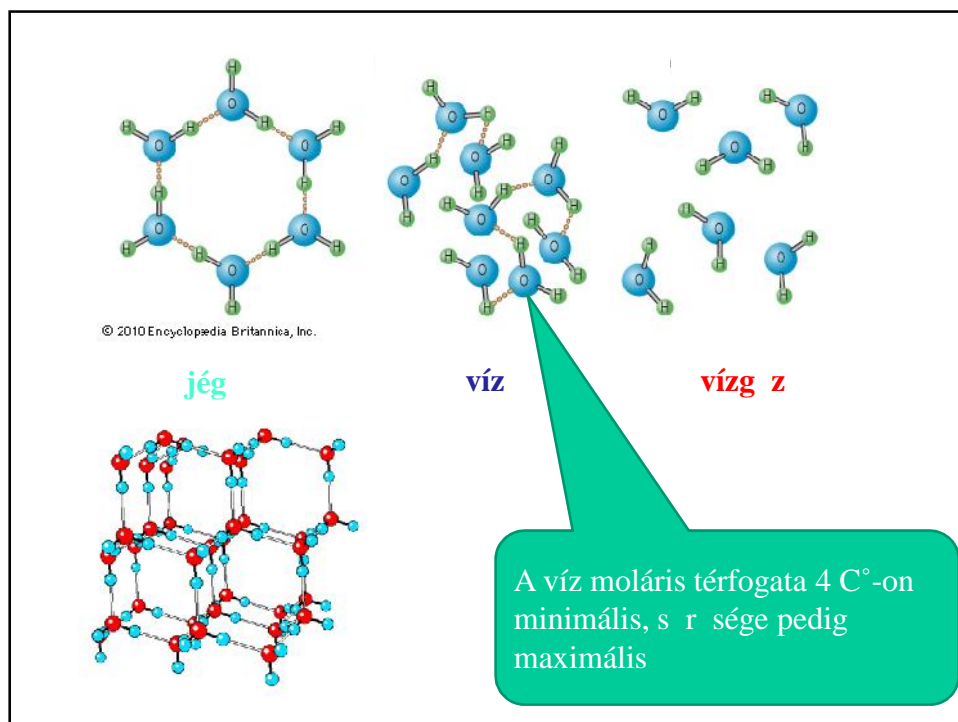
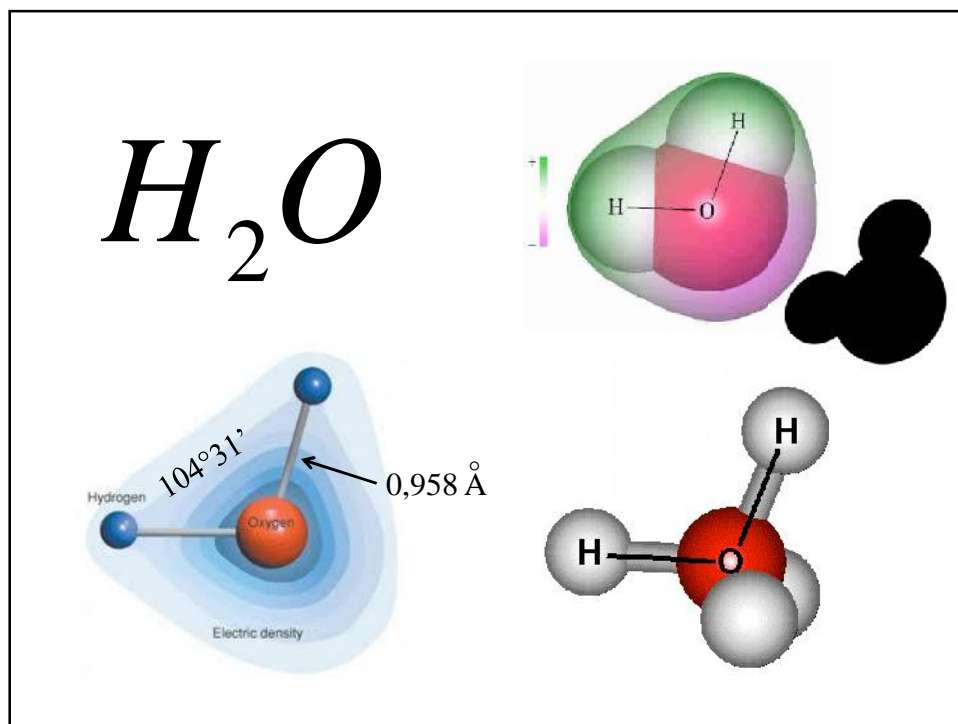


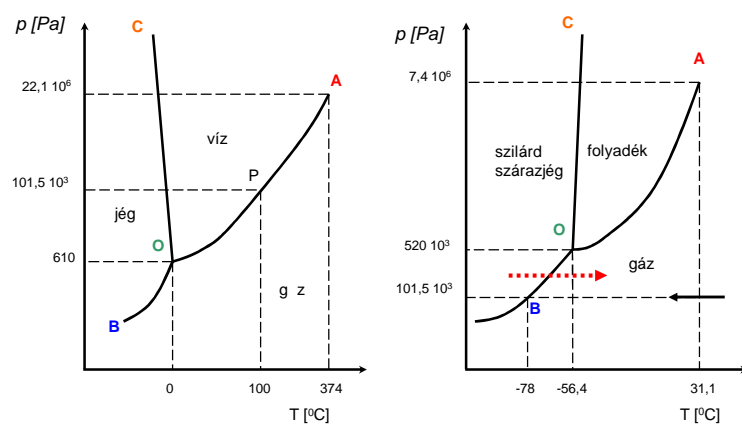
A napi vízleadás és vízfelvétel mérlegének mindkét oldalán átlagosan 2,4 liter szerepel: ennyi víz távozik a szervezetünkben a verejtékezés, a légzés, a kiválasztás és az emésztés folyamán, amit pótolnunk kell. Napi folyadékszükségletünk mintegy felét a táplálékokkal, másik felét víz formájában vesszük magunkhoz.

Egyetlen olyan anyag, amelynek mindhárom halmazállapota megtalálható földi körülmények között (hőmérséklet és nyomás).

Az emberi szervezet igen takarékosan bánik vízkészletével, hiszen naponta mindössze kb. 2,4 litert választ ki, amit táplálék- és folyadékfelvétel útján pótolnunk kell.

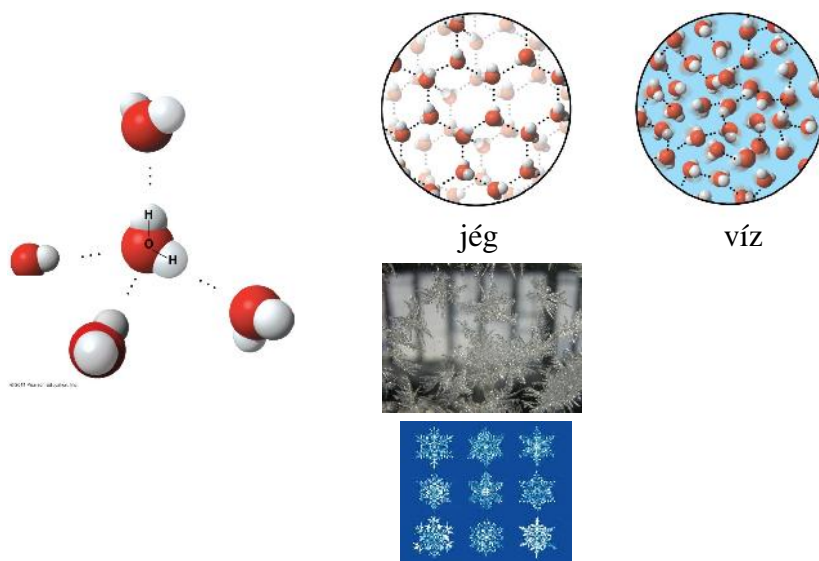
Az elfogyasztott víz bejárja az egész szervezetet. Az emésztérendszerből felszívódik a vérbe, majd az egész szervezetben szétáramlik és a különböző szervekben és szövetekben átmenetileg tárolódik, ahol leadja a benne oldott anyagokat.



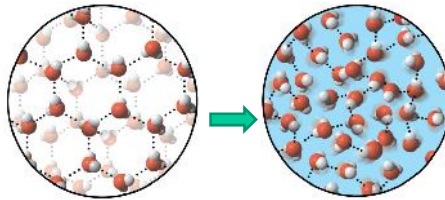


A víz és a szén-dioxid fázisdiagramja.

A legtöbb anyag moláris térfogata a kristályos fázisban kisebb, mint az olvadékban. **Kivétel: a víz**



A víz egyik különlegessége, hogy moláris térfogata 8%-al csökken olvadáskor. Ez azt jelenti, hogy a nyomás növelése az olvadást segíti elő.



jég

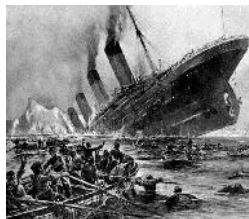
víz



Ha víz a többi folyadékhoz hasonló “normális” folyadékként viselkedne, **nem lennének hegyi patakjaink!**

Mi történne, ha a víz a többi anyaghoz hasonlóan viselkedne?

- nem lennének hegyi patakjaink,
- a jég lesüllyedne a vízben,
- folyók teljes egészében befagynának,



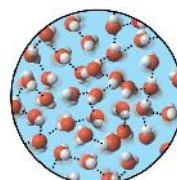
Víz h kapacitása

$$Q = C(T)m\Delta T$$

A folyékony víz h kapacitása jóval nagyobb, mint a többi folyadéké, de nagyobb a szilárdtestek és a gázok h kapacitásánál is. Ez a víz molekulái között kialakuló számtalan H-híd kölcsönhatás következménye.

A jég h kapacitása enyhén növekszik az olvadáspontig, majd ezen túl a folyékony víz megjelenésével a h kapacitás nagymértékben megn. A további h mérsékletnövelés csak viszonylag kismérv h kapacitás növekedést idéz el.

A vízg z h kapacitása kisebb, mint a folyékony vízé.



víz

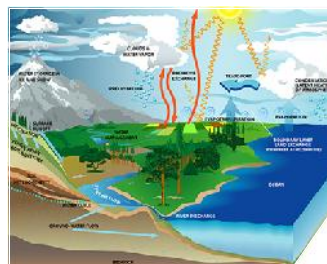
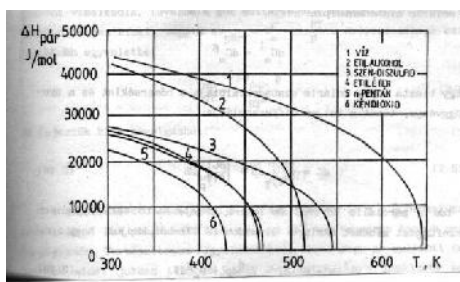
$$E_H = 4 - 40 \text{ kJ / mol}$$

Szerepe az életfolyamatokban:

A metabolikus h h mérséklet növelésének csökkentése.

Egy 60 kg-os személy megközelítőleg 10 MJ nagyságú h t ad le naponta, ha rendszeren táplálkozik. Ez adiabatikus körülmények között 42 °C-os h mérséklet emelkedést jelent

A víz nagy párolgásh je miatt egységnyi térfogatban több energiát tárol, mint a többi „normális” folyadék.



Szerepe az életfolyamatokban:

Hatékony h t folyadék a h mérséklet szabályzásban (izzadás).

Kedveli a poláros felületeket (pl. cellulóz)
(*kapilláris emelkedés*)



Nem kedveli az apoláros felületeket
(pl. teflon)



Nagy felületi feszültség

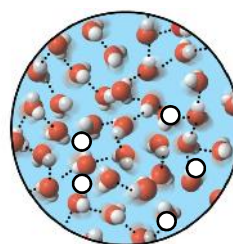
$$\gamma = 72,7 \text{ mN / m} \quad 25 \text{ C}^\circ\text{-on.}$$





Jó oldószer

A hézagos vízszerkezet miatt jó oldószere a gázoknak (O_2, CO_2, \dots)



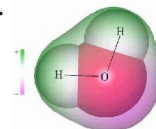
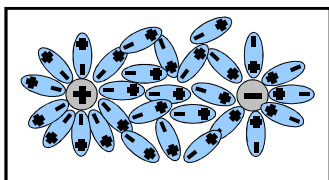
A jól elegyedik poláros molekulákkal (CH_3CH_2OH)

Mengyelejev szabadalma alapján



Jó oldószer

A vízmolekulák az ionok körül rendezett szerkezet **hidrát réteget** hoznak létre. Ezt a folyamatot **hidratációnak** nevezzük.

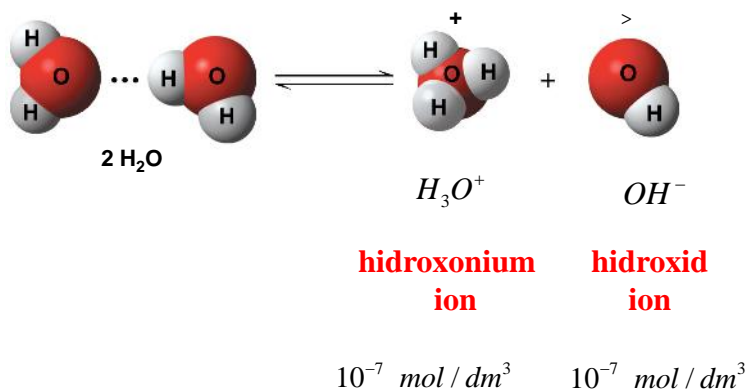


Dielektromos állandó 25 °C-on: 78,54
Dipólus momentum: 1,82 D

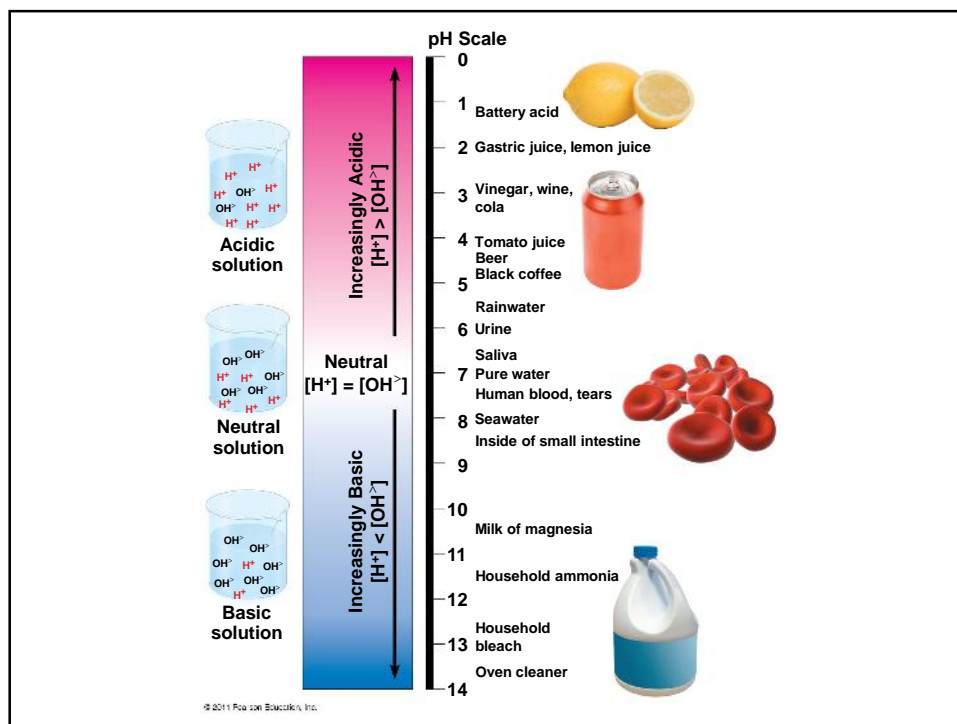
A különböző jelű töltések között ható erők a közeg dielektromos állandójának (relatív permittivitásának) növelésével csökkennek.

A **nagy dielektromos állandójú víz** az ionok kölcsönhatásának energiáját több mint 80-ad részére csökkenti. Ez a nagymérv energia csökkentés felelős a víz kiváló oldó hatásáért.

Autoprotolízis



$K_v = 10^{-14} \rightarrow pH$

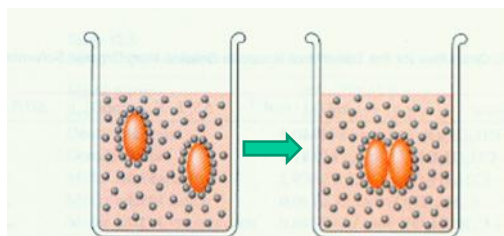


Apoláros molekulák oldása vízben

Hidrofób kölcsönhatás



$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

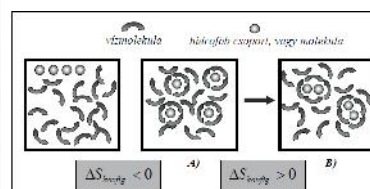


$$\Delta H > 0$$

$$\Delta S > 0 \longrightarrow \Delta G < 0$$

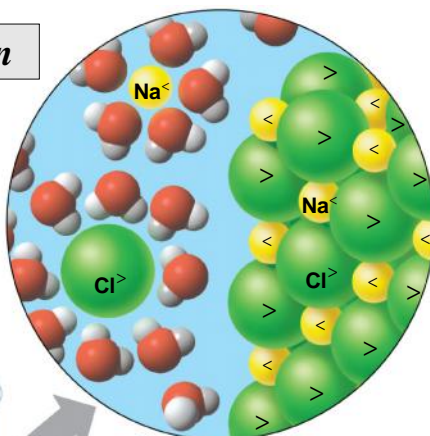


W. Kauzman



Sók oldása vízben

Jó oldószer



Miért különülnek el a kationok és az anionok?
A Coulomb törvény talán nem érvényes?

© 2011 Pearson Education, Inc.

Coulomb törvény

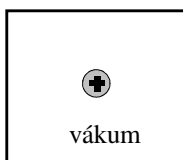
Vákumban!

$$\mathbf{f}_{1,2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r_{1,2}^2} \cdot \mathbf{e}_{1,2}$$

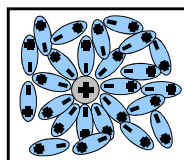
$$\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1}$$



Közeg hatás!



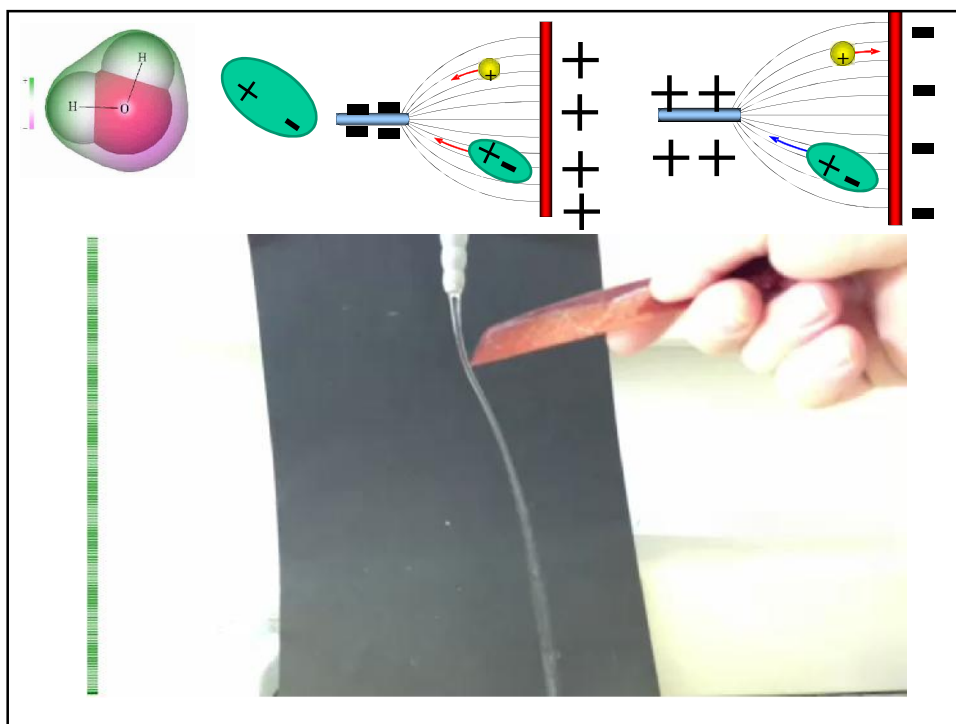
(szolvatáció)
hidratáció



$$\mathbf{f}(\mathbf{r}_{1,2}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{q_1 q_2}{r^2} \mathbf{e}_{1,2}$$

ϵ_r : relatív permittivitás (dielektromos állandó)

Az **árnyékoló hatás** mértéke a molekula elektronszerkezetének aszimmetriájától függ. Ha a molekula poláros, azaz az elektronok molekulán belüli eloszlása nem egyenletes, hanem aszimmetrikus, akkor ez a hatás erősebb, mint apoláros (szimmetrikus elektroneloszlású) molekulák esetében.



Makromolekulák



Kolloid asszociátumok, vagy kovalens
kötés molekulák?



Hermann Staudinger (1881- 1962)

The Nobel Prize in Chemistry 1953

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.

Kötési energiák és a molekulák stabilitása

Single Bonds											
H	C	N	O	F	Si	P	S	Cl	Br	I	
436	415	390	464	569	395	320	340	432	370	295	H
	345	290	350	439	360	265	260	330	275	240	C
		160	200	270	—	210	—	200	245	—	N
			140	185	370	350	—	205	—	200	O
				160	540	489	285	255	235	—	F
					230	215	225	359	290	215	Si
						215	230	330	270	215	P
							215	250	215	—	S
								243	220	210	Cl
									190	180	Br
										150	I

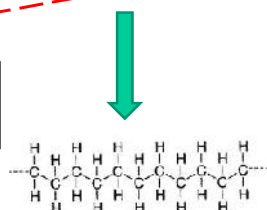
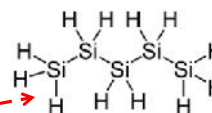
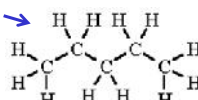
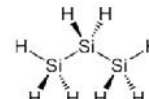
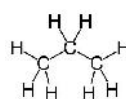
Multiple Bonds					
C=C, 611	C=N, 615	C=O, 741	N=N, 418	O=O, 498	
C≡C, 837	C≡N, 891	C=O, 1080	N≡N, 946		

Szerves és szervetlen polimerek

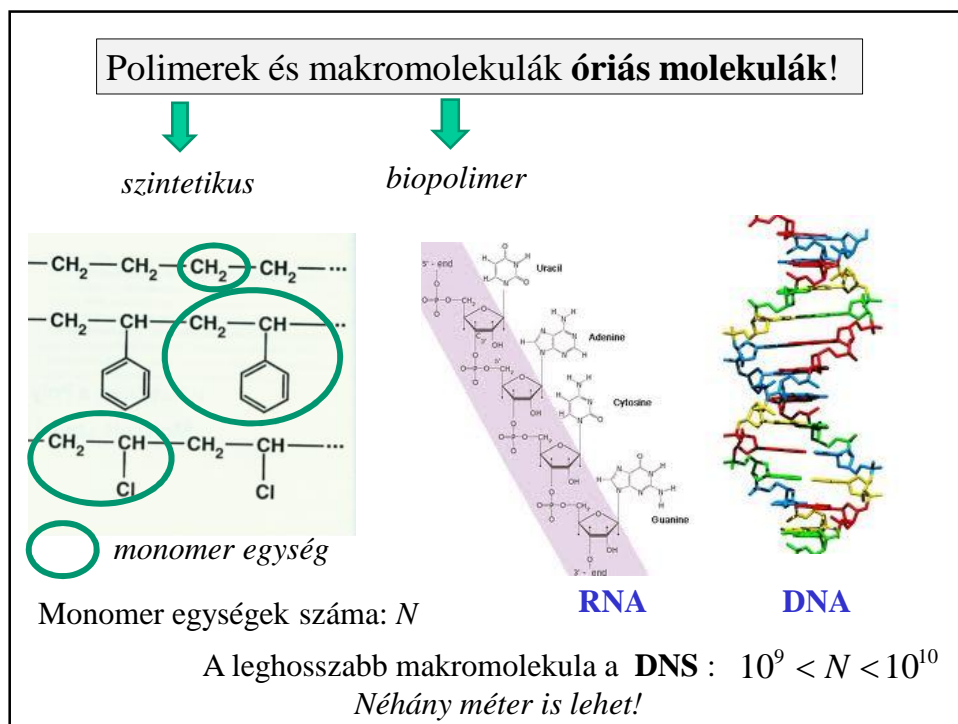
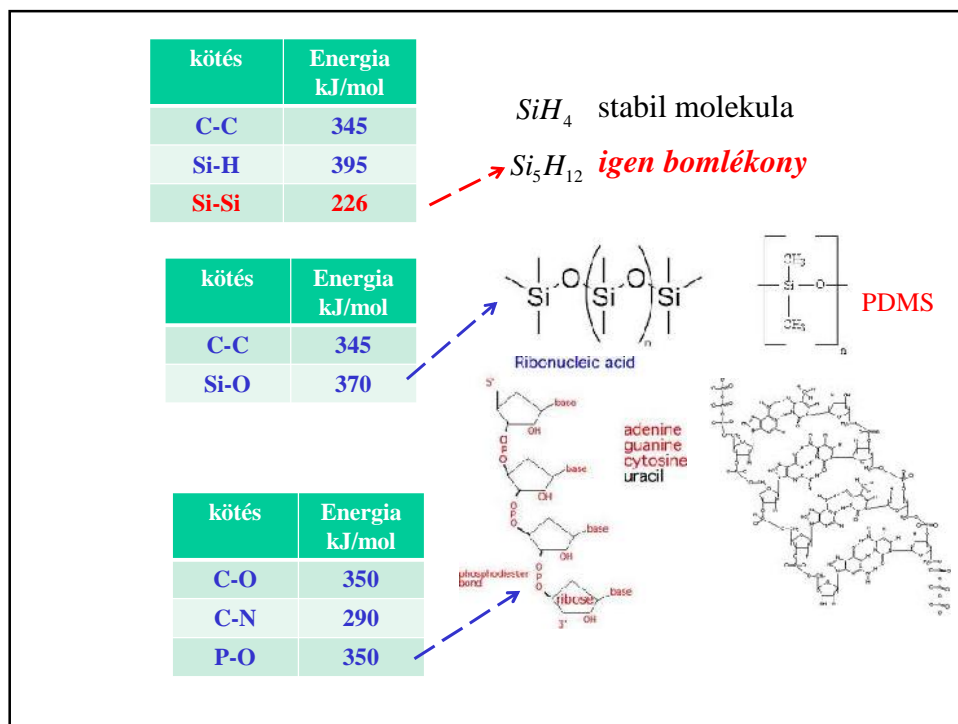
Kötési energiák; kJ/mol







bond	Energy kJ/mol
C-C	345
C-O	350
C-N	290
C-P	265
Si-Si	226







**Nagyobb kötési energia
erősebb kötés!**



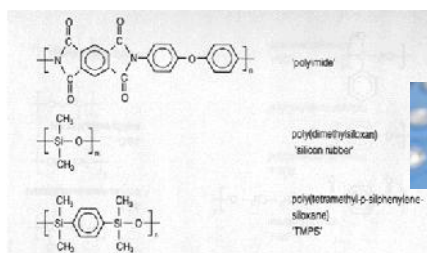
*poliszilán
Nem stabil!*



Monomerek		Monomer egységek		
$\text{H}_2\text{C}=\text{CHCH}_3$	Propylene		$\left[\text{CH}_2-\text{CH} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \end{array} \right]_n$	polypropylene 'PP'
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}(\text{CH}_3)_2$	Isobutylene		$\left[\text{CH}_2-\text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} \right]_n$	polyisobutylene 'PIB'
$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{OH}$	Acrylic acid		$\left[\text{CH}_2-\text{C} \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{C}=\text{O} \\ \text{H} \end{array} \right]_n$	poly(acrylic acid)
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}(\text{CH}_3)-\text{C}(=\text{O})\text{OCH}_3$	Methacrylate		$\left[\text{CH}_2-\text{C} \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{C}=\text{O} \\ \text{CH}_3 \end{array} \right]_n$	poly(methylmethacrylate) 'PMMA'
$\text{H}_3\text{C}-\text{C}(=\text{O})\text{OCH}=\text{CH}_2$	Vinylacetate		$\left[\text{CH}_2-\text{C} \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{C}=\text{O} \\ \text{H} \end{array} \right]_n$	poly(vinylacetate) 'PVAc'
$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{O}-\text{CH}_3$	Vinylmethylether		$\left[\text{CH}_2-\text{CH} \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{CH}_3 \end{array} \right]_n$	poly(vinylmethylether) 'PVME'
$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$	Butadiene		$\left[\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2 \right]_n$	polybutadiene 'PB'
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}(\text{CH}_3)-\text{CH}=\text{CH}_2$	Isoprene		$\left[\text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2 \end{array} \right]_n$	polyisoprene 'PI'

Monomerek		Monomer egységek	
$\left[\text{CH}_2 - \underset{\text{H}}{\overset{\text{Cl}}{\text{C}}} \right]_n$		$\left[\text{CH}_2 - \underset{\text{C}_6\text{H}_5}{\overset{\text{CH}_3}{\text{C}}} \right]_n$	poly(vinyl chloride) 'PVC'
$\left[\text{CH}_2 - \underset{\text{Cl}}{\overset{\text{Cl}}{\text{C}}} \right]_n$		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{O} \right]_n$	poly(vinylidene chloride)
$\left[\text{CF}_2 - \text{CF}_2 \right]_n$		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	poly(tetrafluoroethylene) 'PTFE'
$\left[\text{CH}(\text{CN}) - \text{CH} \right]_n$		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	poly(acrylonitrile) 'PAN'
$\left[\text{O} - \text{CH}_2 \right]_n$		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	poly(oxyethylene) 'POM'
$\left[\text{O} - (\text{CH}_2)_2 \right]_n$		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	poly(ethyleneoxide) 'PEO'
$\left[\text{N} - (\text{CH}_2)_6 - \text{N} - \text{C}(=\text{O}) - (\text{CH}_2)_4 - \text{C}(=\text{O}) \right]_n$		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	poly(hexamethylene adipamide) nylon 6,6
$\left[\text{C}(=\text{O}) - (\text{CH}_2)_5 - \text{N} \right]_n$		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	poly(ε-caprolactam) nylon 6
		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	poly(α-methylstyrene)
		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{O} \right]_n$	poly(phenylene oxide) 'PPO'
		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	poly(ethylene terephthalate) 'PET'
		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	'polycarbonate' 'PC'
		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	'poly(ether ether ketone)' 'PEEK'
		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	'polysulfone'
		$\left[\text{O} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{C} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \text{CH}_3 \end{array} - \text{O} - \text{C} \right]_n$	poly(p-phenylene-terephthalamide) 'Kevlar'

Monomer egységek



Konstitúció - konfiguráció - konformáció

szintetikus
polimerek

biológiai
makromolekulák



DNS:
négy különböz
monomer egység

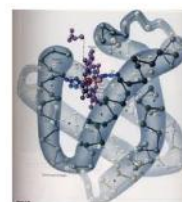
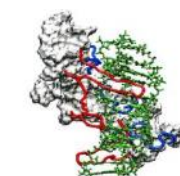
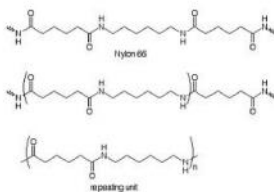
fehérjék:
hús különböző
aminosav

-A-A-A-A-A-A-A-A-A-A-A-A-A-A-A-A-
Homopolymer

A-B-A-A-B-B-B
Random copolymer

A-A-A-A-B-B-B-B-B
Block copolymer

A-A-A-A-A
|
B
|
B
|
B
Graft polymer



Homopolimer



Kopolimer nomenklatura



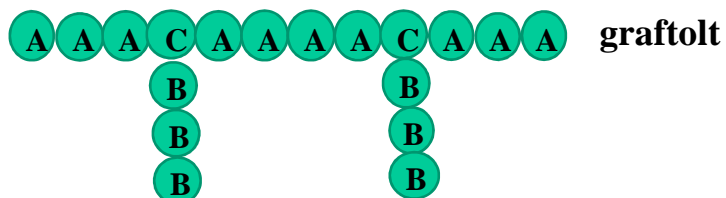
blokkos



alternáló



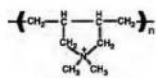
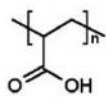
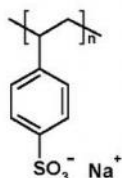
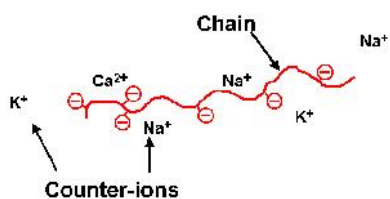
statisztikus



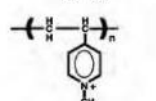
graftolt

Polielektrolitok

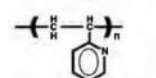
Anionos



P1



P2

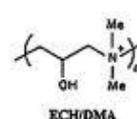


P3

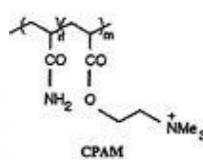
Kationos



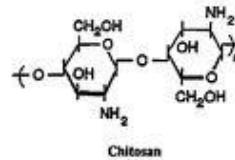
PDADMAC



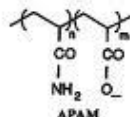
ECH/DMA



CPAM

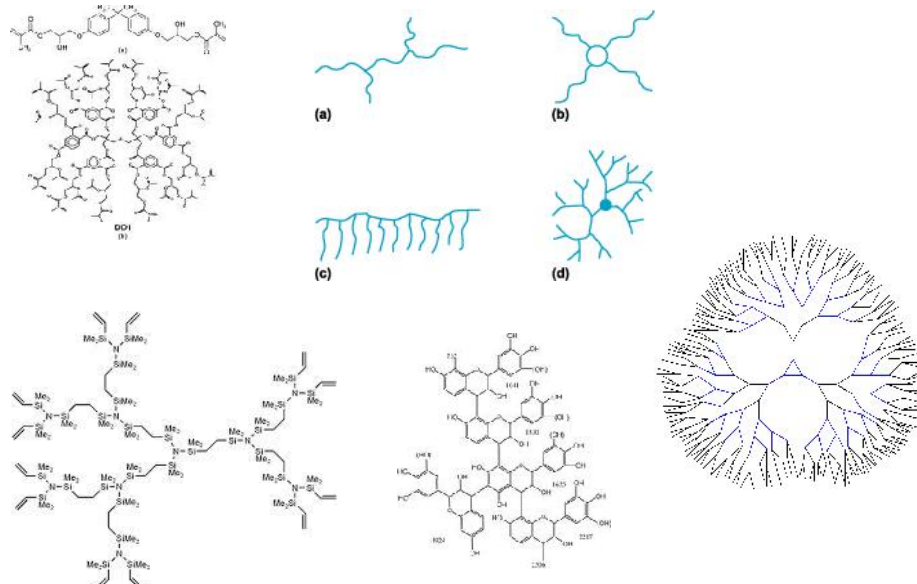


Chitosan

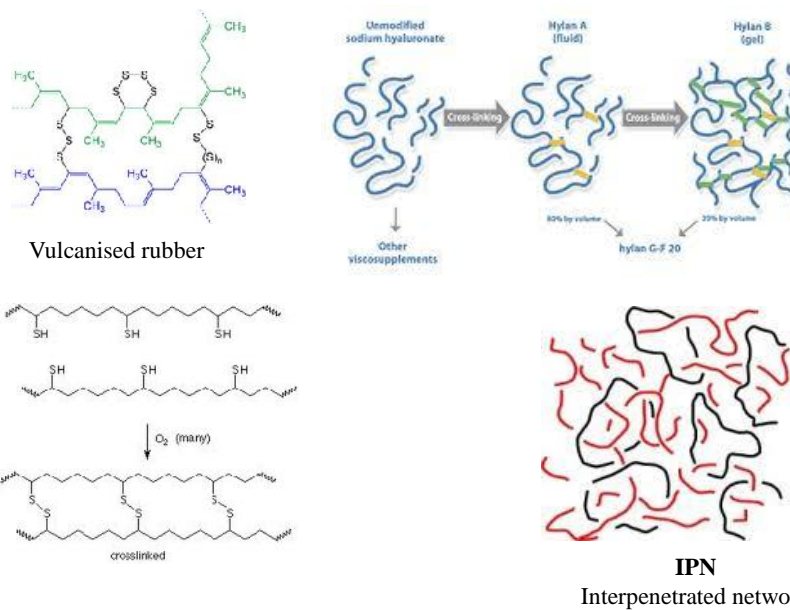


APAM

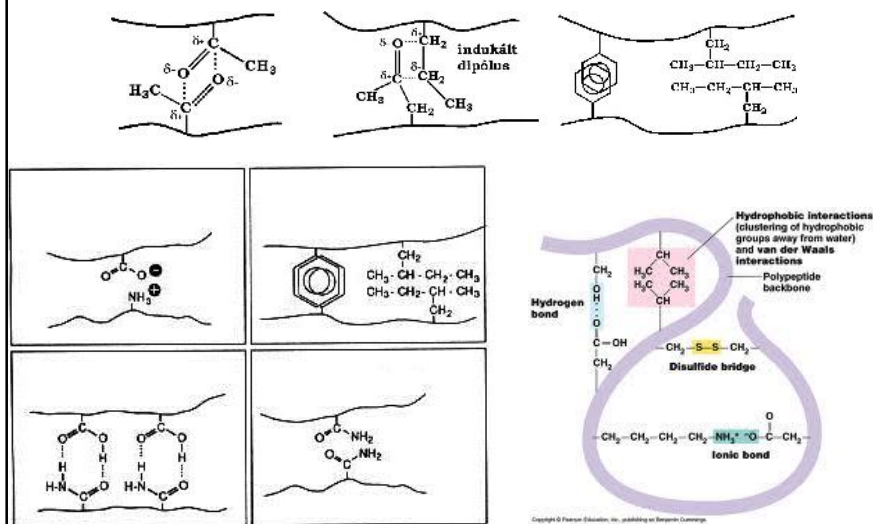
Elágazó polimerek



Térhálós polimerek



Molekuláris kölcsönhatások



Molekulatömeg eloszlás

szintetikus
polimerek



biológiai
makromolekulák

polidiszperz

monodiszperz ?

Molekulatömeg átlagok:

$$M_n = \frac{\sum_i n_i M_i}{\sum_i n_i} \quad M_m = \frac{\sum_i n_i M_i^2}{\sum_i n_i M_i}$$

$$M \approx 10^4 - 10^8$$

$$\text{Polidiszperzitás} = \frac{M_m}{M_n} \geq 1$$

Polimerek szerkezete

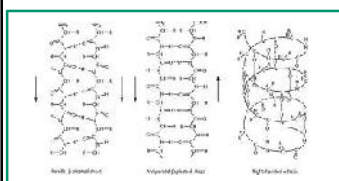
Konstitúció konfiguráció konformáció

Elsőleges szerkezet:

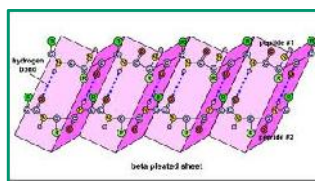
Human's genom project: complete primary structure of a human's DNA molecule
if $N \sim 10^2$ and 20 different monomer units, then 20^{100} different molecules!

Másodlagos szerkezet:

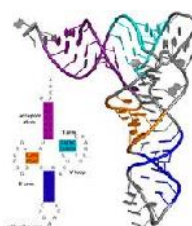
Azonos konformációjú egységek rendezett strukturája!
Pl. keratin, fibroin



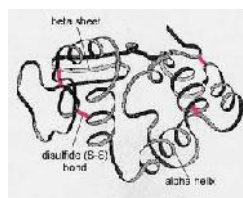
α helix



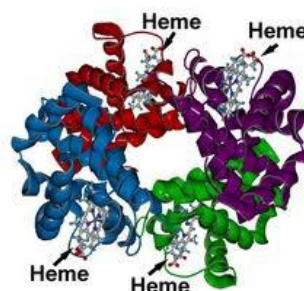
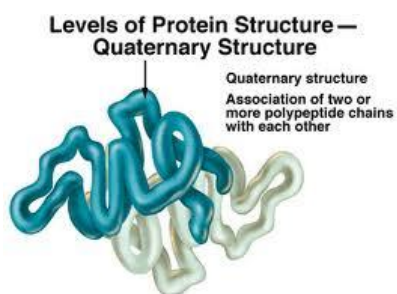
β structure



Harmadlagos szerkezet (globuláris fehérjék):



Negyedleges szerkezet (több fehérjéből álló komplex egység):



Polimer láncok hajlékonysága

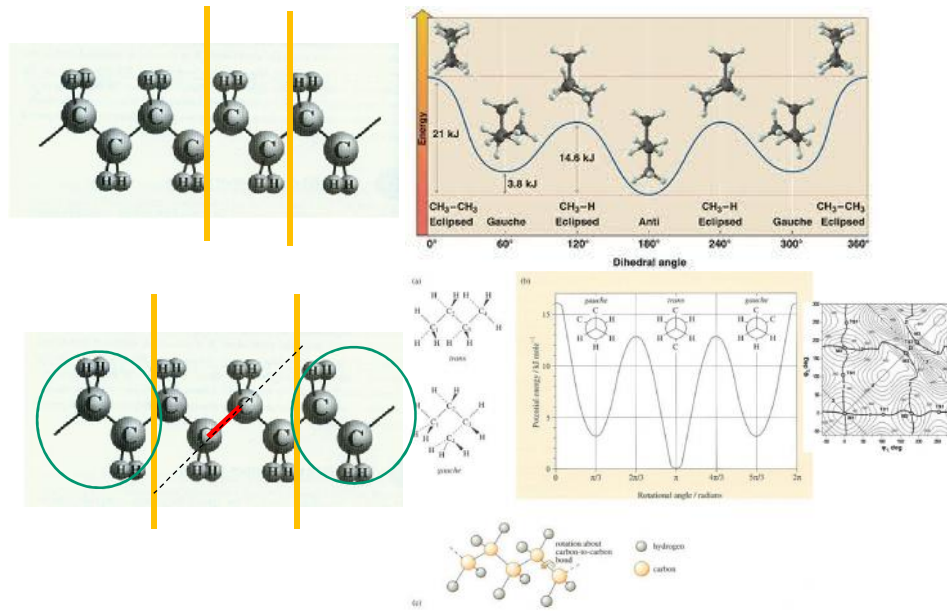
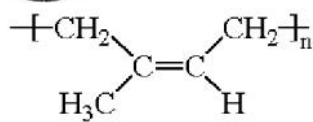
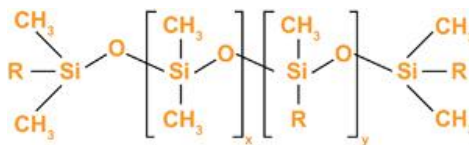


Figure 1.23. Bond vectors in the bead-stick model with a fixed bond angle.

Hajlékony láncú polimerek



kaucsuk,
polyisoprene



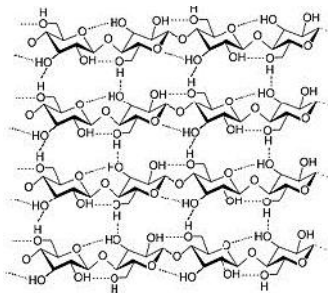
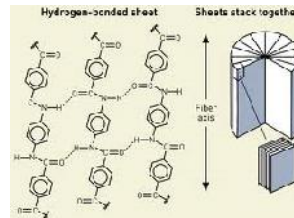
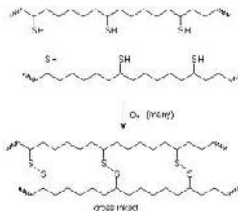
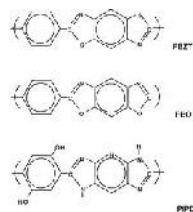
R = -OH, -CH=CH₂, -CH₃, or another alkyl or aryl group

szilikon gumi,
polidimetilsziloxán

A rotáló egységek közötti távolság növelése kedvez a hajlékonyságnak!

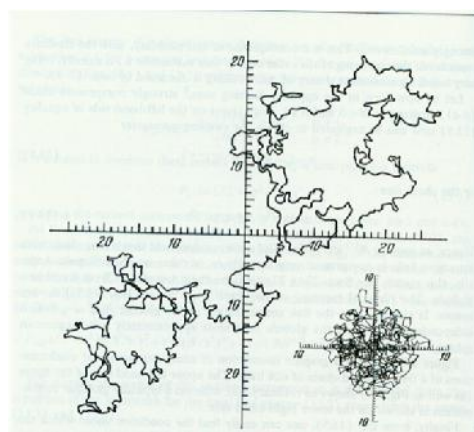
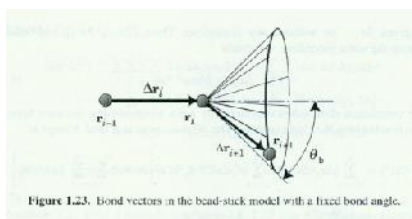


Merev polimer láncok



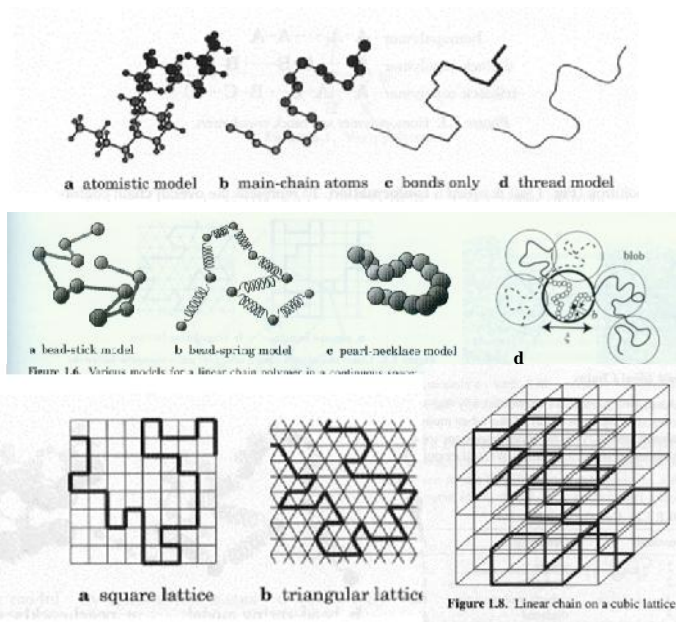
A láncokon belüli és a láncok közötti H-hidak merevítik a szerkezetet.

Hajlékonyláncú polimerek



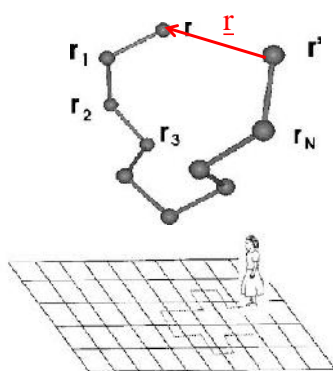
Tipikus konformációja a statisztikus gombolyagnak.

Hajlékony polimerek modelljei



Ideális makromolekula

Analógia a bolyongás és a konformáció között.



$$\underline{r} = \sum_{i=1}^{N_s} \underline{r}_i \quad \langle \underline{r} \rangle = 0$$

$$\langle \underline{r}^2 \rangle \neq 0$$

$$r^2 = \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} \underline{r}_i \cdot \underline{r}_j = \sum_{i=1}^{N_s} r_i^2 + 2 \sum_{i < j} \underline{r}_i \cdot \underline{r}_j = N a_s^2 + 2 \sum_{i < j} a_s^2 \cos \Gamma_{ij}$$

$$R_0 \equiv \langle r^2 \rangle^{1/2}$$

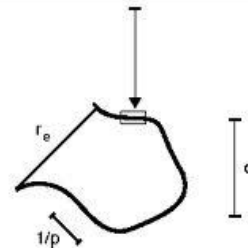
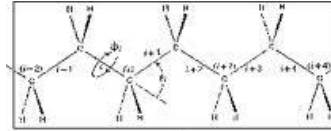
$$R_0 = a_s N_s^{1/2}$$

Rövidtávú kölcsönhatások (kémiai szerkezet)

Vegyérték szög $\rightarrow R_l = l \left(\frac{1 + \cos \theta}{1 - \cos \theta} \right)^{1/2} \cdot N^{1/2}$

Vegyérték szög + Rotációs energia $\rightarrow R_{l,\theta} = l \left(\frac{1 + \cos \theta}{1 - \cos \theta} \frac{1 + \langle \cos \theta \rangle}{1 - \langle \cos \theta \rangle} \right)^{1/2} N^{1/2}$

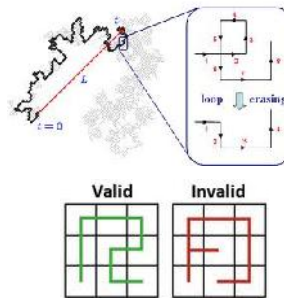
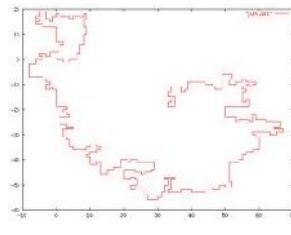
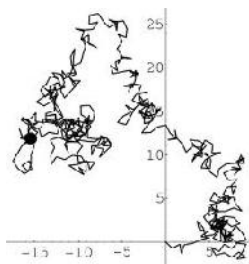
$$\langle \cos \theta \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \cos \theta \cdot e^{-\frac{U(\theta)}{RT}} d\theta$$



Ideális makromolekula

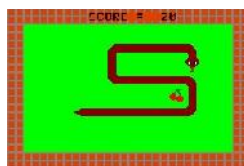
$$R_{\Theta} = \sqrt{C_{\infty}} \cdot N^{1/2} = C_{\infty} R_0 \quad \rightarrow \quad R_{\Theta} = \sqrt{C_{\infty}} \cdot N^{1/2} = a_s N_s^{1/2}$$

Karakterisztikus arány



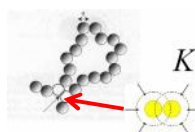
bolyongás
random walk (RW)

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



önelkerül bolyongás
self avoiding walk (SAW)

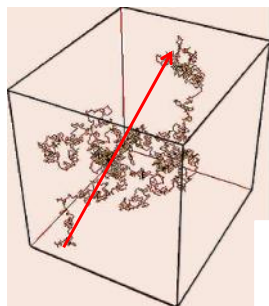
$$R_0 = a_s N_s^{\epsilon} \quad \epsilon = 0.588 \approx 3/5$$



Kizárt térfogat hatás!

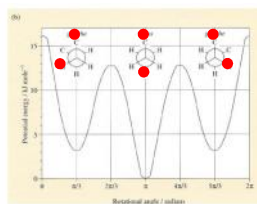
A **W termodinamikai valószínűség** megadja az adott **makroállapothoz tartozó mikroállapotok** számát.

példa: makroállapot: láncvégtávolság
mikroállapot: lehetséges konformációk száma



gombolyag, g

$$S = k_B \ln W$$



$$N_{C-C} = 10^4$$

$$W_g = 3^{10000}$$

$$S_g = k_B T \ln(3^{10000})$$

$$S_g = 10^4 k_B T \ln 3$$



nyújtott, ny

$$N_{C-C} = 10^4$$

$$W_{ny} = 1$$

$$S_{ny} = k_B T \ln 1$$

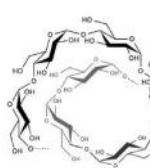
$$S_{ny} = 0$$

Térszerkezet és konformációs entrópia

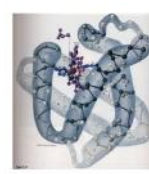
konstitúció - konfiguráció - konformáció



Statisztikus gombolyag

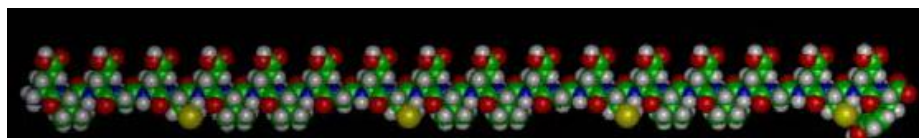


Szabályos térszerkezet



Nagy konformációs entrópia

Jóval kisebb konformációs entrópia



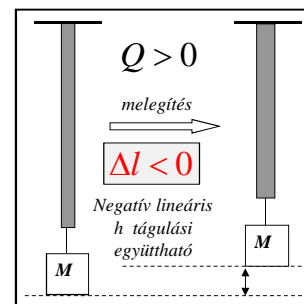
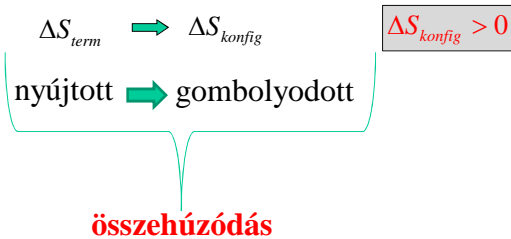
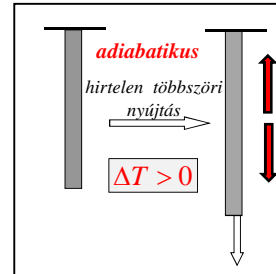
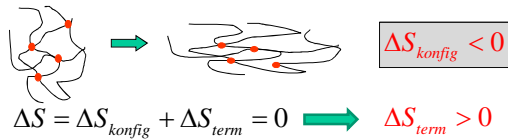
$$W=1$$



$$S_{konf} = 0$$

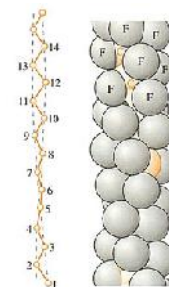
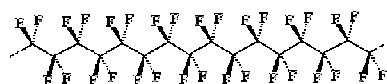
MAKROMOLEKULÁK RUGALMASSÁGA

Entrópia rugalmasság

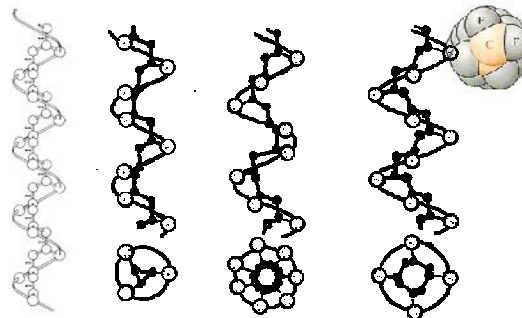
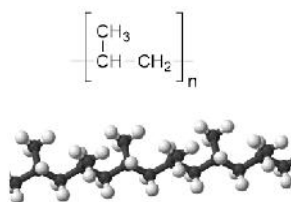


Rendezett szerkezetek

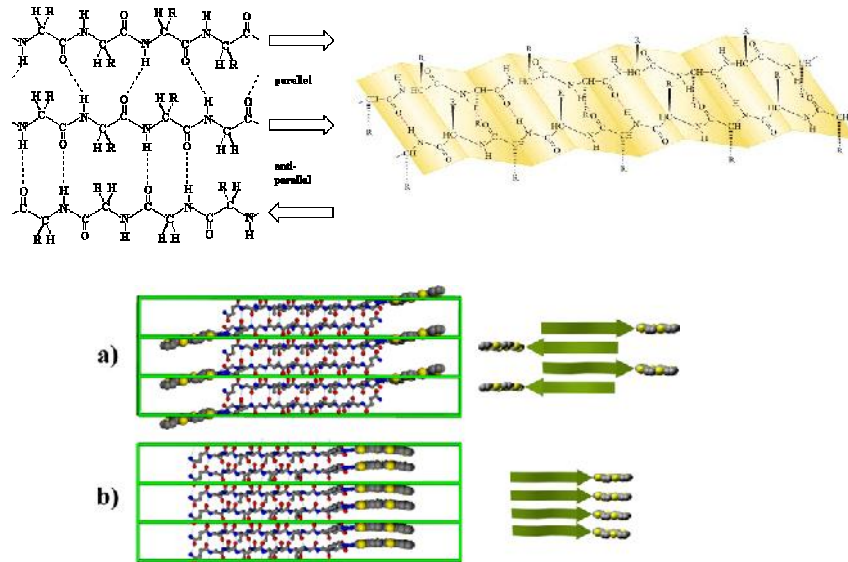
Teflon hélix



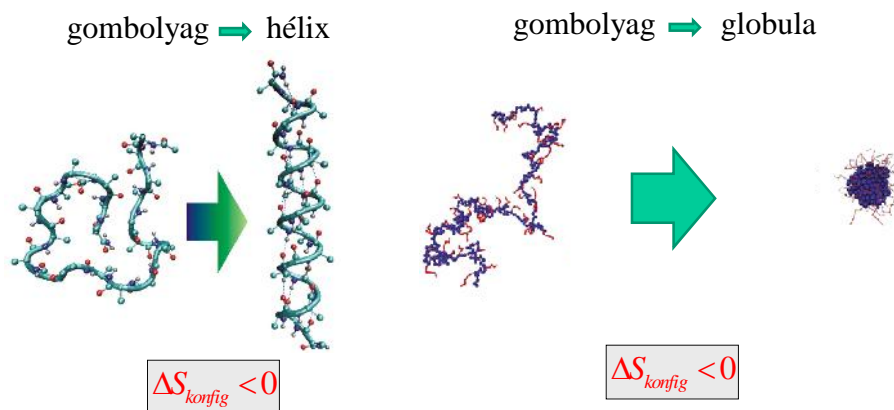
Izotaktikus
szerkezetek
hélicei



Rendezett szerkezetek



Molekuláris rendezés

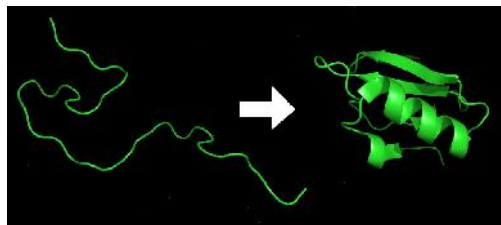


Akkor mi a hajtóer ?

A MÁSODLAGOS SZERKEZET KIALAKULÁSÁNAK HAJTÓEREJE

hajtóer

$$\Delta G < 0$$



A konformációs entrópia csökken!



$$\Delta G_{konf} = \Delta H_{konf} - T\Delta S_{konf}$$

$$\Delta H_{konf} \leq 0$$

$$\Delta S_{konf} < 0$$



$$\Delta G_{konf} > 0 \quad ?$$

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

← Hidrofób kölcsönhatás

Hidrofób kölcsönhatás

hajtóer

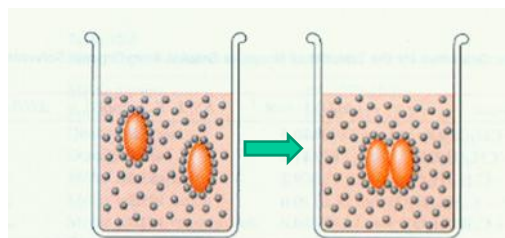


$$\Delta S > 0$$



$$\Delta G < 0$$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$



$$\Delta H > 0$$

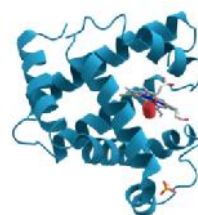
$$\Delta S > 0$$



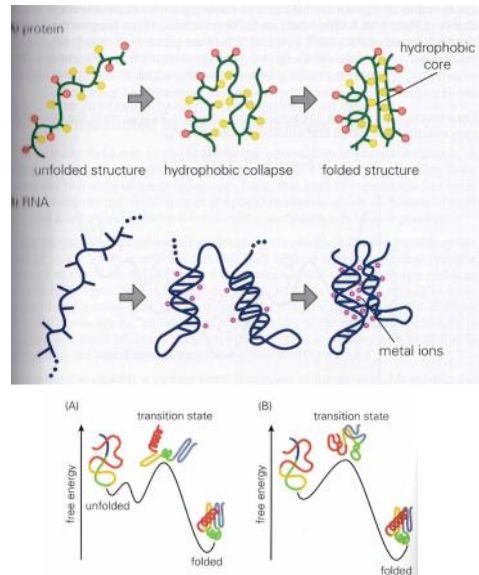
$$\Delta G < 0$$



W. Kauzman



A hajtogatódás termodinamikai hajtóereje a hidrofób kölcsönhatás



ELEGYEDÉS HAJTÓEREJE

$$\Delta_e G < 0$$

$$\Delta_e G = \Delta_e H - T \Delta_e S$$

elegyedési h

endoterm atermik exoterm

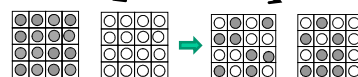
$$\Delta_e H > 0$$

$$\Delta_e H = 0$$

$$\Delta_e H < 0$$

elegyedési entrópia

Molekuláris
rendezettség változása



$$\Delta_e S > 0$$

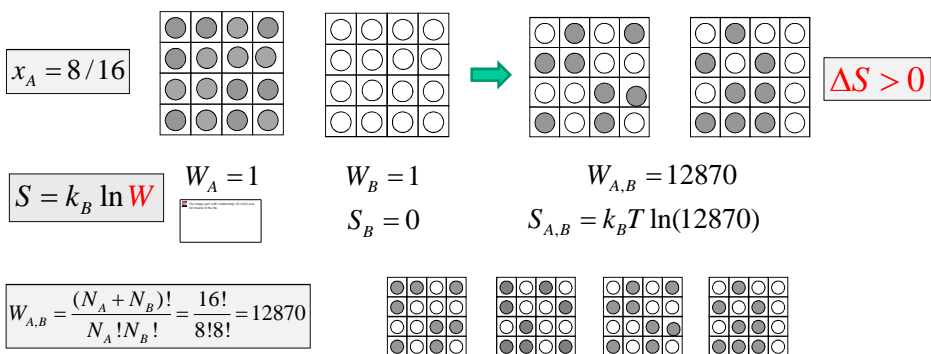
A **W** termodinamikai valószínűség megadja az adott makroállapothoz tartozó mikroállapotok számát.

1. példa:

makroállapot: koncentráció

mikroállapot: lehetséges

$$W = \frac{16!}{8!8!} = 12870$$



Négy különböző mikroállapot a lehetséges 12870 számúból.

Miért oldódnak jobban a kismolekulájú anyagok?

$$\Delta_e G = \Delta_e H - T \Delta_e S$$

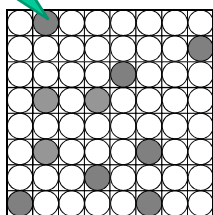
$$\text{Atermikus eset: } \Delta_e G \cong -T \Delta_e S$$

monomer

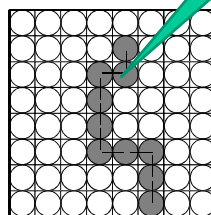
$$S = k_B \ln W$$

polimer

$$c = \frac{10}{64}$$



$$c = \frac{10}{64}$$



$$W_{A,B} = \frac{(N_A + N_B)!}{N_A! N_B!} = 1,51 \cdot 10^{11}$$

$$S_{A,B} = k_B \ln(1,51 \cdot 10^{11})$$

$$\Delta G_{A,B} = -k_B T \ln(1,51 \cdot 10^{11})$$

$$W_{A,B} = 64 \cdot 4 \cdot 3^8 = 6144$$

$$S_{P,A} = k_B \ln(6144)$$

$$\Delta G_{P,A} = -k_B T \ln(6144)$$

Nagyobb termodinamikai hajtóer !

Kisebb termodinamikai hajtóer !

GÉLEK

Könnyebb körülírni, mint definiálni. (P.J.Flory)

Átmenet a szilárd testek és a folyadékok között.

Főbb jellegzetességek:



3D szerkezet

nagy mennyiség fluid fázis

Termikus stabilitás alapján:

- **termoreverzibilis** (fizikai)
- **permanens** (kémiai)



Gélesedés:

viszkozitás \rightarrow végtelen a gélpontnál
modulusz \rightarrow növekszik a gélponttól



oldat \rightarrow gél pont \rightarrow szilárdtest

Polimergélek anyagi intelligenciája

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

környezeti változás

h mérséklet,
összetétel,
pH,
specifikus ionok,
felületaktív anyagok,
electromos tér,
mágneses tér.

válasz reakció

térfogat változás
és az ettől
függő tulajdonságok
(optikai, mechanikai,
termodinamikai,
transzport and kinetikai)

Fizikai gél képződése:



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



Kémiai gél képződése:

- *térhálósítás*
- *térhálósító polimerizáció*

