

A VÍZ BIOFIZIKÁJA

MÁRTONFALVI ZSOLT

1

Víz

- *Inspiráció* forrása (zene, festészet).
- Thales (Kr. e. 580): "...a víz minden dolgok forrása..."
- Henry Cavendish (1783): a víz H_2O .
- Egyedüli vegyület, amely a természetben mindhárom halmazállapotban előfordul (szilárd, folyadék, gáz).
- A föld felszínének 71 %-át borítja ("kék bolygó").
- Az élet számára nélkülözhetetlen:
98% - medúza
94% - három hónapos magzat
72% - újszülött
60% - felnőtt
- Átlagos napi szükséglet: 2.4 l.



Georg Friedrich Händel (1685-1759): "Víz zene".



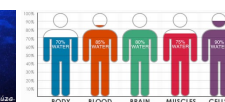
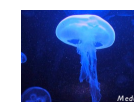
Georg Friedrich Händel (középen) és L. György (jobbán) a Tamásán, 1717. július 17-én.



Hokusai (1760-1849): A nagy hullám (Kanagawa).



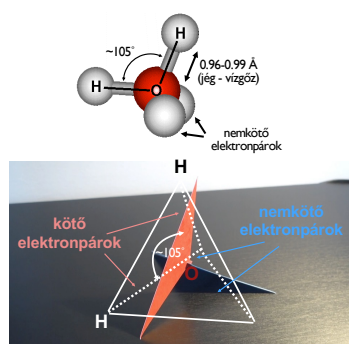
Az óceánok folyamatos áramlatai a Föld felületén (NASA).



2

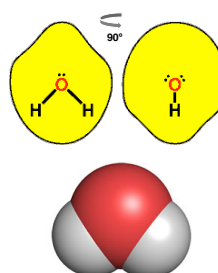
A vízmolekula szerkezete

Elektronpár geometria tetraédres



Alakja „V”-re hasonlít

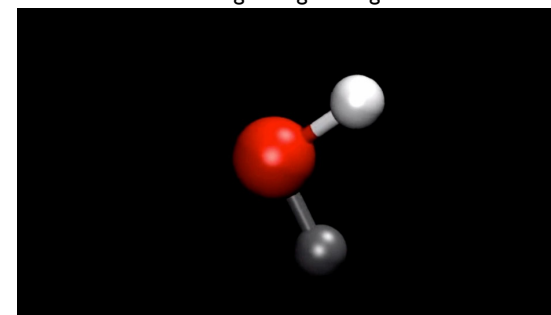
van der Waals sugár: ~ 3.2 Å
Nem gömb alakú molekula



3

A vízmolekula dinamikája

Forgó-rezgő mozgás

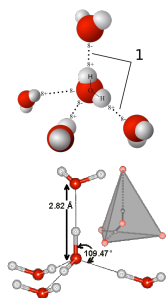


Abszorpció az infravörös, vörös tartományban →
természetes vizek "kék" színe

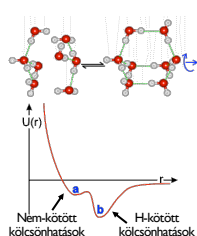
4

A cseppfolyós víz szerkezete

Hidrogénkötések a vízmolekula környezetében: a víz pentamer kialakulása

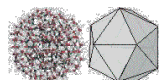


H-híd: kohézió + tasztítás
Cluster képződés: biciklo-oktamer



Klaszterekből hálózat:
280 molekulából
ikozaéder szerkezet

(Középső: 20 azonos egyenlő oldalú
háromszöggel határolt szabályos térdom)

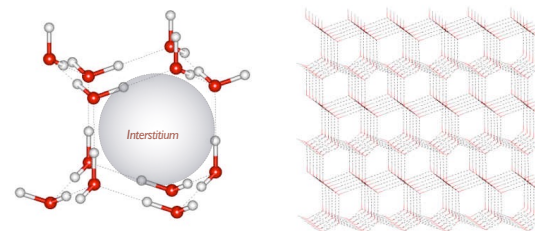


Térbeli hálózatos szerkezet:
magyarázhatja a víz anomális
tulajdonságait

5

A jég szerkezete

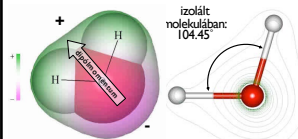
- 9 módosulat
- Közöséges jég: hexagonális szerkezet
- Koordinációs szám: 4 (minden molekula 4 másikat koordinál)
- Interstitium: elférne benne egy vízmolekula



6

A víz fizikai tulajdonságai I.

Nagy állandó dipólmomentum



Dipólmomentum: megadja egy testen belül a pozitív és negatív elektromos töltések elkülönülésének mértékét. Vektor mennyiség, nagysága és iránya jellemzi a molekula polaritását.

$$p = q \cdot d$$

p – dipólusmomentum (m.e.: $C \cdot m$)
 q – elektromos töltés (m.e.: C)
 d – töltések közötti távolság (m.e.: m)

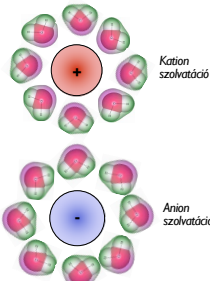
Vegyület	Dipólmomentum ($\times 10^{-30} C \cdot m$)
CO_2	0
CO	0.4
O_3	1.8
NH_3	4.7
H_2O	6.2
KBr	34.7

A vízszűrő kiterül
Coulomb erők hatására



Prof. Zsolt Miklós fotója

Jó oldószer



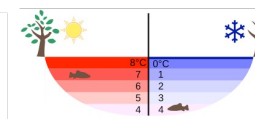
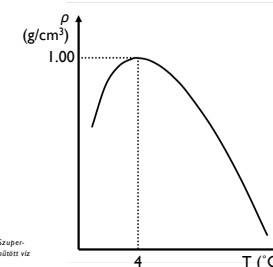
Mikrohullámú sütő: a víz dipóljai forognak a periódusosan változó elektromágneses térben. A vízmolekulák többlet mozgási energiája hő formájában disszipálódik, felmelegítve a környezetet.

7

A víz fizikai tulajdonságai II.

Anomális sűrűség-hőmérséklet függvény

Hőmérséklet ($^{\circ}C$)	Sűrűség (kg/m^3)
+100	958.4
+80	971.8
+60	983.2
+40	992.2
+30	995.6502
+25	997.0479
+22	997.7735
+20	998.2071
+15	999.1026
+10	999.7026
+4	999.9720
0	999.8395
-10	998.117
-20	993.547
-30	983.854



Következmények:

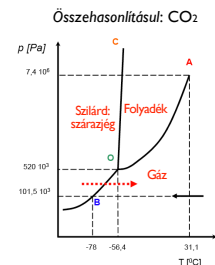
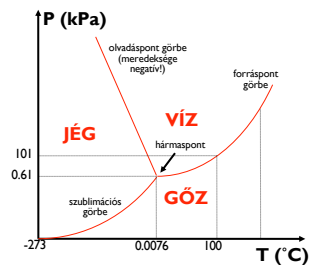
- A $4^{\circ}C$ -os víz mindig a tő alján.
- Az élet fennmarad a befagyott tő alatt.
- Folyók áramlása fennmarad a jég alatt.

8

A víz fizikai tulajdonságai III.

Anomális fázisdiagram

- *Fázisgörbe: két fázis egyensúlyban
- *Fázisgörbék közötti terület: egyetlen fázis van jelen
- *Metszéspont: hármaspont



9

A víz fizikai tulajdonságai IV.

Nagy felületi feszültség

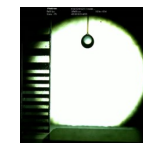
Felületi feszültség: a folyadék kontrakciós tendenciája; emiatt a csepp gömb alakot igyekszik felvenni.
A felület növeléséhez szükséges munka.

$$\gamma = \frac{W}{A} = \left[\frac{J}{m^2} = \frac{N}{m} \right]$$

A folyadék belsejében és felületén fellépő kohéziós erők közötti egyenlőség.

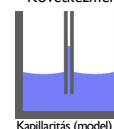


Következmények **hidrofób** felületen



Superhidrofób felületen perzisztáló vízsepp

Következmények **hidrofil** felületen



Kapillaritás (model)

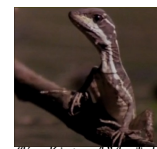


Kapillaritás a gyökérműködést elősegíti

Következmények **makroszkopikus** rendszerekben



Mainarokak



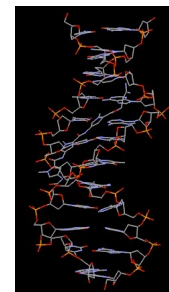
"Jézus Krisztus gyök" (baziliszkusz)

10

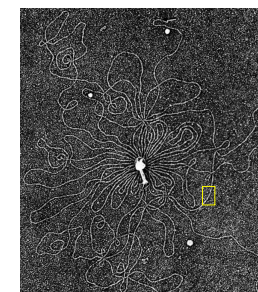
BIOLÓGIAI MAKROMOLEKULÁK BIOFIZIKÁJA

11

A biológiai makromolekulák HATALMAS molekulák



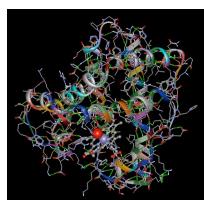
DNS dupla hélix



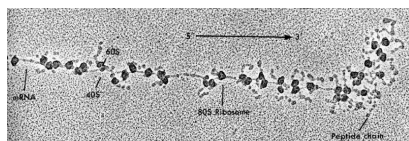
Bakteriofágból kiszabaduló DNS fonál

12

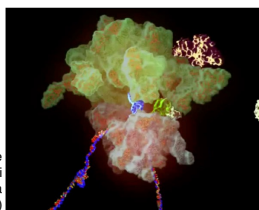
A biológiai makromolekulák IZGALMAS molekulák



Hemoglobin alegység
tér szerkezeti modellje



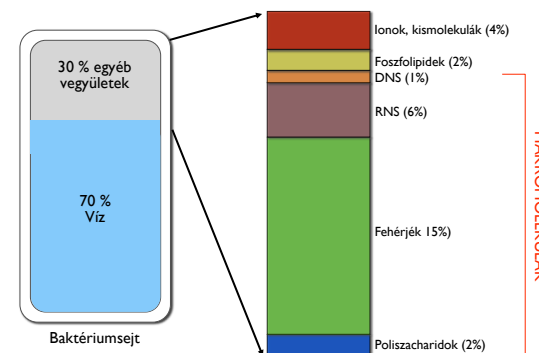
Újonnan termelődő fehérje (selyemfibroin)



Naszcens fehérje
gombolyodási
folyamata
(riboszómán)

13

A makromolekulák tömeg szerinti mennyisége a sejtben **NAGY**



14

Biológiai makromolekulák: biopolimérek

Polimérek:
Építőközből, monomerekből felépülő láncok

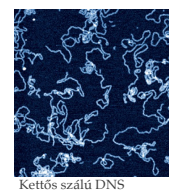
Monomerek száma: $N \gg 1$;
Típusosan, $N \sim 10^2 \cdot 10^4$,
de DNS: $N \sim 10^9 \cdot 10^{10}$

Biopolimer	Alegység	Kötés
Fehérje	Aminosav	Kovalens (peptidkötés)
Nukleinsav (RNS, DNS)	Nukleotid (CTUGA)	Kovalens (foszfodiészter)
Poliszacharid (pl. glikogén)	Cukor (pl. glükóz)	Kovalens (α -glikozid)
Fehérjepolimer (pl. mikrotubulus)	Fehérje (pl. tubulin)	Másodlagos

15

Milyen alakúak a biopolimerek?

Biopolimerek alakját leíró paraméterek



Kettős szálú DNS

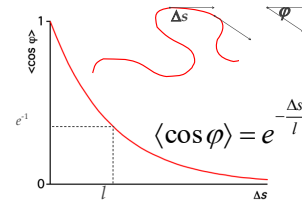


Kontúrhossz (L): A lánc teljes hossza

Vég-vég hossz (R): A lánc két végpontja között mért távolság.

Perzisztenciahossz (l): jellemzi a
láncirányultság állandóságát.

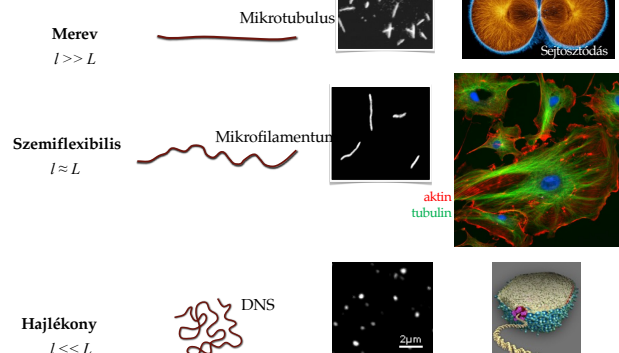
A rövidebb perzisztenciahosszal rendelkező
polimerek rugalmasabbak.



16

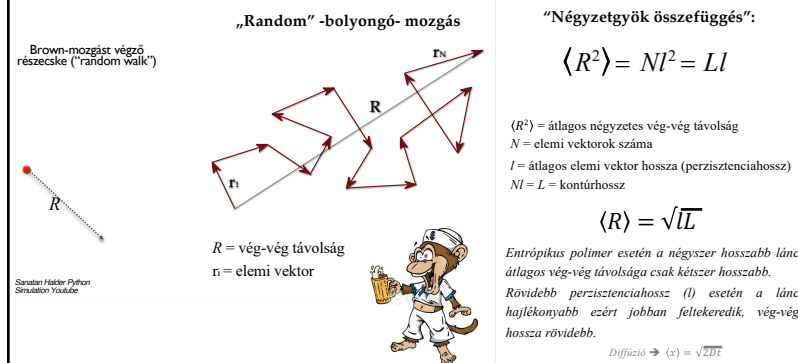
Biopolimerek osztályozása hajlékonyságuk alapján

l = perzisztenciahossz
 L = kontúrhossz



17

A biopolimerek alakja a „bolyongó mozgás” segítségével leírható



18

Rugalmasak-e a biopolimerek?

Igen, de nem érvényes Hooke törvénye. Rugalmasságuk nem lineáris.

Entrópiás rugalmasság

Hőmérsékleti energia ($k_B T$) a láncban hajlítómozgásokat gerjeszt

A lánc rendezetlensége (entrópiája) növekszik.

A lánc rövidül

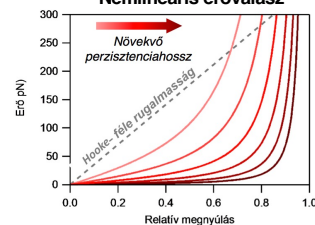


A megrövidült lánc erővel kinyújtható

$$F \sim \frac{k_B T}{l} \cdot \frac{R}{L} + \left(\frac{R}{L} \right)^3$$

F = erő
 l = perzisztenciahossz
 k_B = Boltzmann állandó
 T = abszolút hőmérséklet
 L = kontúrhossz
 R = vég-vég hossz
 R/L = relatív megnyúlás

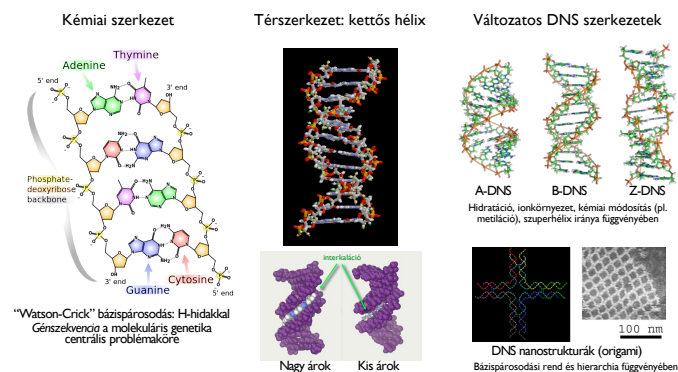
Nemlineáris erőváz



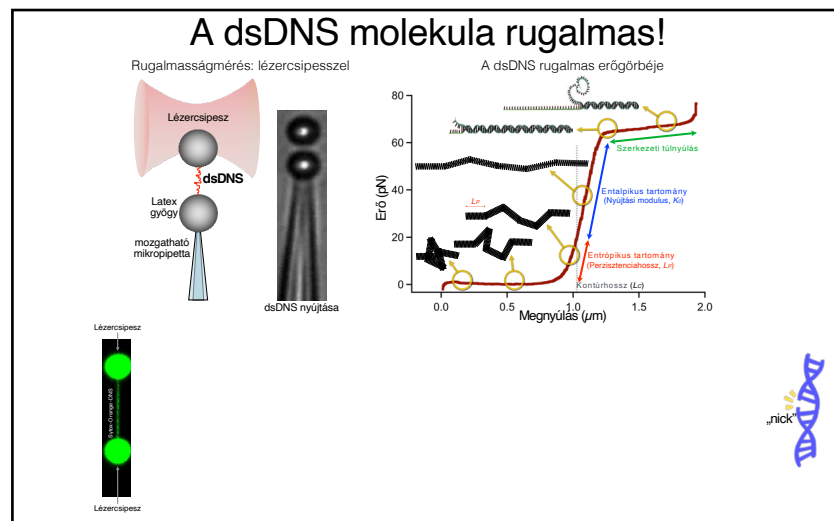
19

I. DNS: dezoxiribonukleinsav

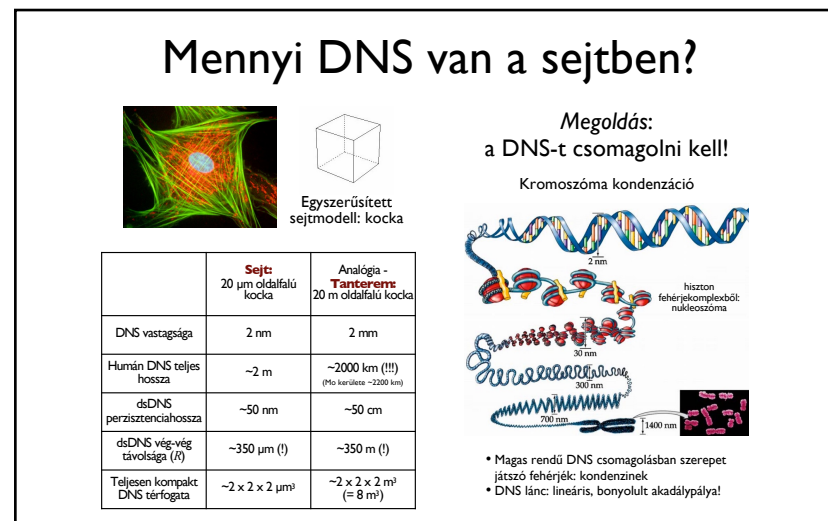
A biológiai raktármemória molekulája



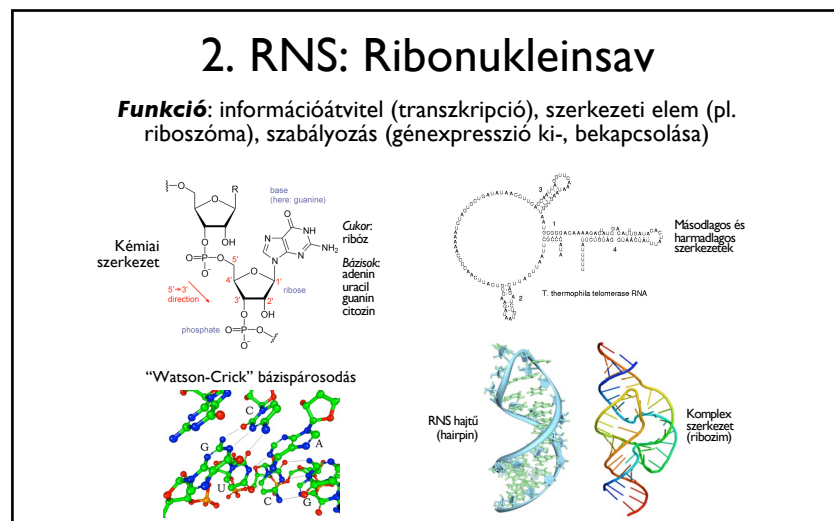
20



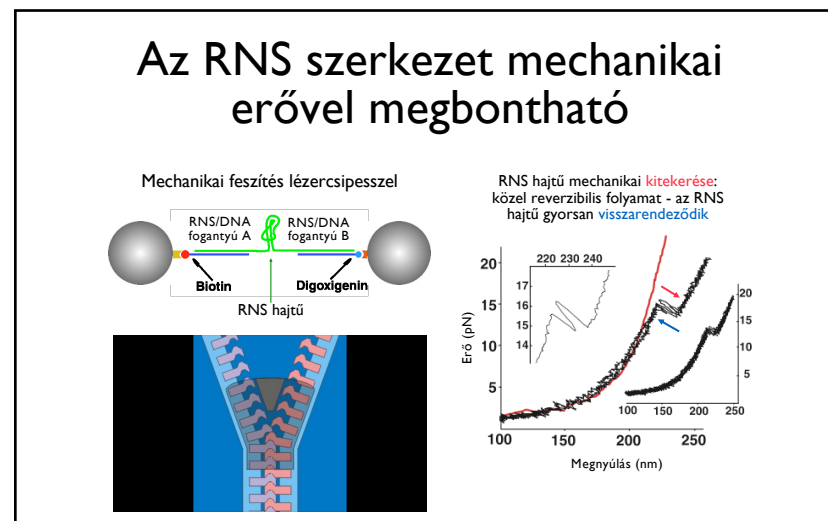
21



22



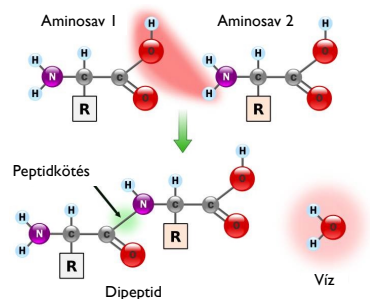
23



24

3. Fehérjék: peptid kötéssel egybekapcsolt biopolimérek

Funkció: az élet legfontosabb molekulái - rendkívül változatos funkciók: szerkezet, kémiai katalízis, energiaátalakítás, motorikus feladatok, stb.



A peptidkötés és kialakulása: víz felszabadulással járó kondenzációs reakció

25

Fehérjék szerkezete

Elsődleges

Aminosav-sorrend

Meghatározza a térszerkezetet is

Másodlagos

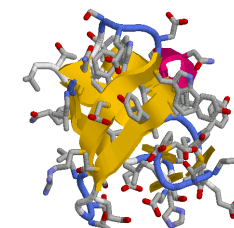
α -hélix
 β -lemez
 β -kanyar (hajtű)

α -hélix
• jobbménetes
• 3,4 aminosav/emelkedés
• H-hidak

β -lemez:
• párhuzam v. antipárhuzam
• H-hidak távoli aminosavak között

Harmadlagos

Egyláncú fehérje teljes térszerkezete



*Negyedleges szerkezet: önálló alegységek komplexbe kapcsolódása

26

Fehérjeszerkezetet összetartó kölcsönhatások

1. **Hidrogén híd:** megosztott proton a protondonor oldalláncok között.
2. **Elektrosztatikus kölcsönhatás** (sókötés): ellentétesen töltött részek között.
3. **van der Waals kötés:** lezárt elektronhéjak közötti gyenge kölcsönhatás.
4. **Hidrofób-hidrofób kölcsönhatás:** hidrofób molekularészek között (molekula belsejében).
5. **Diszulfid híd:** cisztein aminosavak között; egymástól távol levő láncokat kapcsol össze.

Gyenge (másodlagos) kötések

Kovalens kötés

27

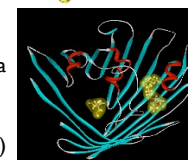
Fehérjeszerkezeti osztályok

1. Tiszta alfa



calmodulin

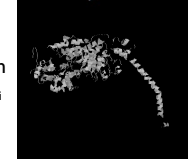
2. Tiszta béta



porin

(3. Alfa-béta)

4. Multidomén
Domén: fehérjekomplex "alegység"



miozin

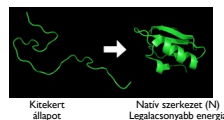
Bár ahány fehérje, annyi egyedi szekvencia, a térszerkezet alapján a fehérjék néhány fő osztályba sorolhatók!

28

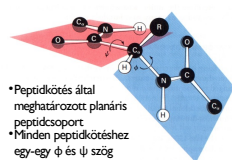
Hogyan alakul ki a fehérje térszerkezete?



Anfinsen: a fehérjék spontán gombolyodnak (az aminosav sorrend meghatározza a szerkezetet)



Levinthal-féle paradoxon (Cyrus Levinthal, 1969):
Kipróbálja-e a fehérje az összes lehetséges konformációt?



A lehetséges konformációk (szabadsági fokok) száma:

i = az egyetlen ϕ vagy ψ szöghöz tartozó elméletileg lehetséges szögállások száma
 n = ϕ vagy ψ szögek összes száma

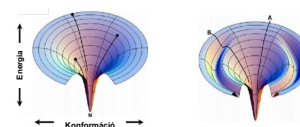
Pl.: 100 aminosavból álló peptidben a ϕ vagy ψ szögállások lehetséges száma legyen 2.
 $n=198$. Szabadsági fokok száma 2^{198} !!!!



29

A fehérjegombolyodást a konformációs tér alakja vezérli

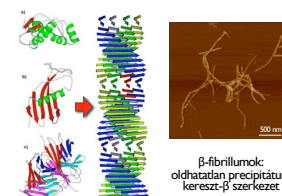
Konformációs tér: gombolyodási tölcser ("folding funnel")



- A fehérjék "lecsúsznak a tölcser oldalán"
- A tölcser alakja bizonyult lehet (az alak teljes meghatározása nehézkes)
- A fehérje elakadhat köztes konformációs állapotokban (pathologia!)
- Az élő sejt chaperon (dajka-) fehérjékkel segíti a gombolyodást

Pathológia

- Fehérjegombolyodási rendellenességek ("folding disease")
- Alzheimer-kór
- Parkinson-kór
- II. típusú diabetes
- Familiális amiloidotikus neuropátia



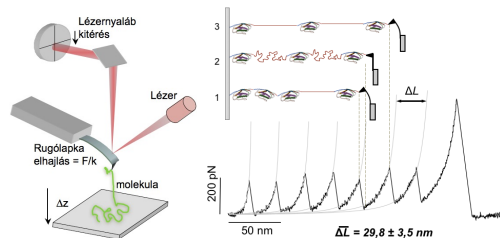
30

Fehérjekitekerési módszerek

- Hő
- Kémiai ágens
- Mechanikai erő

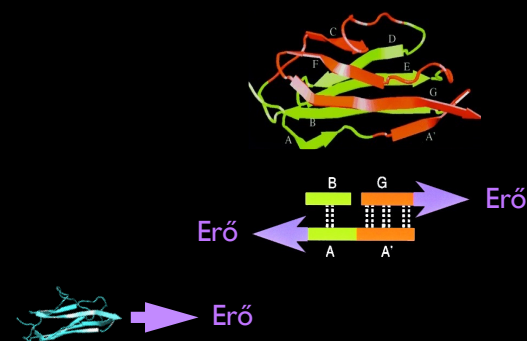
Felszakítják a másodlagos kémiai kötések
Megbontják a másodlagos, harmadlagos szerkezetet

Egyetlen fehérjemolekula mechanikai kitekerése atomerőmikroszkóppal



31

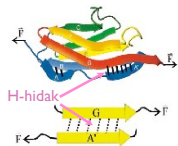
Mechanikai stabilitás szerkezeti alapja



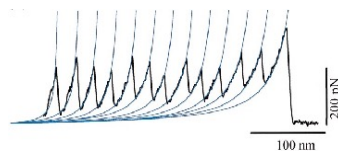
32

A mechanikai stabilitás biológiai logikája

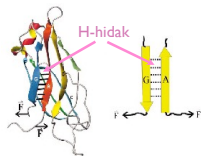
Szerkezetet összetartó H-hidak párhuzamos csatolása



Nagy kiterjedési erő



Szerkezetet összetartó H-hidak soros csatolása



Alacsony kiterjedési erő

