



Biofizika

(molekuláris biofizika és biológiai anyagtan)

2017, tavaszi szemeszter

Tárgy előadója: **Fidy Judit és Zrínyi Miklós**

Tárgy gyakorlatainak felelősei:

Dr. Jedlovsky-Hajdú Angéla, tudományos munkatárs
hajdu.angela@med.semmelweis-univ.hu

PROGRAM

Febr. 08. Az élő rendszerek termodinamikája (bioenergetikája). (Zrínyi Miklós)

Febr. 15. Biológiai rendszerek különleges komponensei: a víz és a makromolekulák (Zrínyi Miklós)

Febr. 22. Biokompatibilis és biodegradábilis polimerek orvosi biológiai felhasználása (Jedlovsky-Hajdú Angéla)

Márc. 1. Makromolekulák hajlékonyságát és rendezett szerkezeit meghatározó tényezők. (Zrínyi Miklós)

Márc. 8. Egyedi biomolekulák és sejtek mechanikai tulajdonságai és mérési módszereik. (Kellermayer Miklós)

Márc. 15. Nemzeti ünnep

Márc. 22. Transzport jelenségek az élő szervezetben I. (Zrínyi Miklós)

Márc. 29. Transzport jelenségek az élő szervezetben II. (Zrínyi Miklós)

Követelmény:

Az aláírás feltétele az **előadásokon** szerzett **minimum 8 pont** elérése (minden előadáson 1 pont szerezhető, összesen max 13), a **gyakorlatok teljesítése** és a jegyzőkönyvek elfogadása.

Valamint a szorgalmi időszak végén íratott **1 zárthelyi** dolgozaton legalább **elégséges** eredmény elérése (csak a gyakorlat anyaga). Amennyiben a zárthelyi dolgozaton a hallgató **60%-nál** jobb eredményt ér el, szóbeli vizsgát tehet.

A vizsgaidőszakban szóbeli vizsgát tartunk az előadás és a gyakorlatok anyagából. Az előadások anyagából a **szóbeli vizsga** két vizsgarészből áll, mindkét tételsorból **2-2 rövid tétel** húzásával. A végső jegy megállapítása a rész-vizsgajegyek alapján a vizsgáztatók egyeztetésével történik. Amennyiben **bármelyik részvizsga eredménye nem éri el az elégséges szintet, a vizsga elégtelen eredménnyel zárul.**



hajdu.angela @med.semmelweis-univ.hu

Ápr. 5. Elektromágneses sugárzások kölcsönhatása szövetekkel és szöveti komponensekkel I. Optikai tartomány. Fényforrások és orvosi alkalmazások (Fidy Judit)

Ápr. 12. Tavaszi szünet

Ápr. 19. Elektromágneses sugárzások kölcsönhatása szövetekkel és szöveti komponensekkel II. Röntgen és gamma tartomány (Fidy Judit)

Ápr. 26. Ultrahang terjedése szövetekben, az orvosi alkalmazások szempontjai. (Fidy Judit)

Május 3. Szövetek kölcsönhatása mágneses térrel. Mag mágneses rezonancia szövetekben, az orvosi alkalmazások alapjai. (Fidy Judit)

Május 10. Fehérjék szerkezetének predikciója, szerkezeti adatok felhasználása adatbázisok segítségével, a számítógépes molekuladinamikai modellezés alapjai. (Hegedüs Tamás)

Május 17. Biomolekulák elektromos tulajdonságai, bioelektronikai megközelítések, nanotechnológiai alkalmazások. (Dér András, MTA SzBK)



SEMELWEIS EGYETEM

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet,
Nanokémiai Kutatócsoport



Biofizikai termodinamika (Bio-termodinamika, vagy bioenergetika)

Az energia biológiai hasznosításának tudománya.

Zrínyi Miklós

egyetemi tanár, az MTA rendes tagja
mikloszrinyi@gmail.com

2017

ÉLŐ ANYAG, BIOANYAG ÉS BIOMIMETIKUS ANYAG

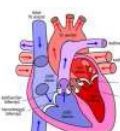
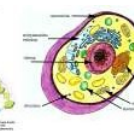
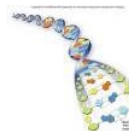
Élő anyag (rendszer), amely vegetatív (*önfenntartó*) és szaporító (*önreprodukáló*) (élet)jelenségeket mutat.

Bioanyagoknak (biomaterials) az élővilágot alkotó-, az élő szervezetek által előállított-, vagy befogadott (szintetikus) anyagokat nevezzük.

Biomimetikus anyagok azok a szintetikus anyagokat, amelyek összetételét, struktúráját vagy funkcióját a természetből vett példa szolgáltatja.

anyagtudomány  biológiai anyagtudomány

A **biofizika** életfolyamatok és biológiai rendszerek tulajdonságainak leírása a fizika és fizikai-kémia törvényei alapján. Értelmezési tartománya kiterjed minden élőlényre, a makroszkopikus testektől az egysejtűekig. Egyedi biomolekulák jellemzése is a biofizika tárgykörébe tartozik.



biológiai
rendszerek

Az **anyagtudomány** az anyagok szerkezetével, tulajdonságaival, a **szerkezet és a tulajdonságok** közötti összefüggésekkel, a tulajdonságok megváltoztatásának, valamint új tulajdonságú anyagok előállításának elvi alapjaival foglalkozó tudomány.

A **biológiai anyagtudomány** az anyagok szerkezetével, tulajdonságaival, a **szerkezet és a funkció** közötti összefüggésekkel, a tulajdonságok megváltoztatásának, valamint új tulajdonságú **biokompatibilis** és **biodegradábilis** anyagok előállításának és felhasználásának elvi alapjaival foglalkozó tudomány.

Technikai anyag



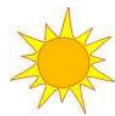
Élő anyag

monolit
állandóság
korrózió, károsodás
passzív
mérnöki struktúrák
elektronok
változatos energiaforrások
termikusan ellenálló
folyamatos energia ellátás

hierarchikus
folytonos megújulás
öngyógyulás
alkalmazkodó képesség
önszerveződő struktúrák
ionok
ATP
hőmérséklet érzékeny
szakaszos energia ellátás

**KÉMIAI SZERKEZET
TULAJDONSÁG
FELHASZNÁLÁS**

**KÉMIAI SZERKEZET
TULAJDONSÁG
FUNKCIÓ**



fototróf



élőlények

kemotróf



fény
 H_2O
 CO_2



szénhidrát
növényi
szövet



zsír
állati
szövet

Az élő szervezet sejtjeiben végbemenő folyamatok összessége:
metabolizmus

felépítő folyamatok
anabolizmus

rendezetlen + **energia** → **rend**

lebontó folyamatok
katabolizmus

rend → **rendezetlen** + **energia**

A nap a földi élet energiaforrása

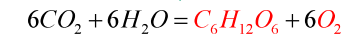
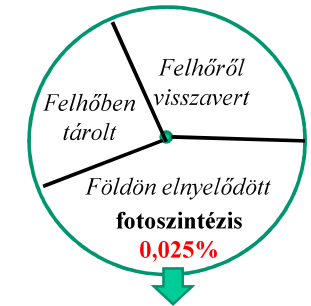


$5 \cdot 10^{18} \text{ MJ / év}$

$1,7 \cdot 10^{17} \text{ J / s}$



ÉLET



Biológiai makromolekulák

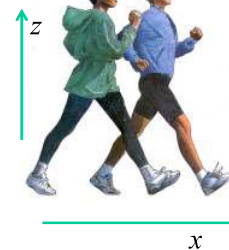
keményítő

glikogén

cellulóz



A mozgás mechanikai energiája



$$E_{mech} = E_{kin} + E_{pot}$$

$$E_{kin} = E_h + E_v = \frac{1}{2} m_b \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} m_b \left(\frac{dz}{dt} \right)^2$$

$$E_{pot}(t) = m_b \cdot g \cdot z_m(t)$$

$$E_{kin} + E_{pot} = \text{állandó} \text{ ?}$$

Teljes energiamérleg több tagból áll!

$$E_{tot} = E_{kin} + E_{pot} + E_{met} + E_{therm} + \dots + E_{??}$$

$$dE_{tot} = ?$$



Az energiamegmaradás tétele



Leibniz (1676-1689) megfigyelte, hogy sok mechanikai rendszerben a mozgási energia (*élőerő*) megmarad.



Newton és **Descartes** megfogalmazzák az impulzusmegmaradás törvényét.



Rumford 1798-ban megfigyelte, hogy az ágyúcsövek fűrése hőkéltéssel jár: a mechanikai munka hővé alakítható!

Mayer felismerte, hogy a hő is, meg a mechanikai munka is, az energia egy formája.

Joule 1843-ban kísérletekkel meghatározta a hő mechanikai egyenértékét.

Helmholtz 1847-ben megfogalmazza az energiamegmaradás tételét

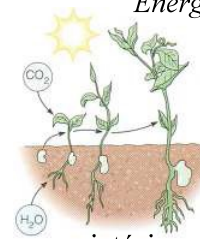
Az energia hasznosítására vonatkozó legáltalánosabb elmélet



termodinamika

Az energia biológiai hasznosítása

Energia : munkavégző képesség ?



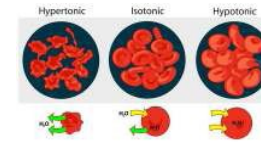
szintézis



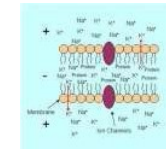
fizikai munka



izom munka



ozmotikus munka



elektrokémiai
munka

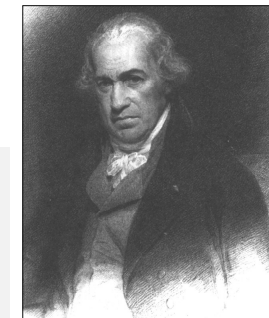


fotokémiai
munka

Honnan van a hasznosítható energia ?



$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W$$



A **termodinamika** a fizikának a hő-jelenségekkel foglalkozó ágából mára az **energetikai kölcsönhatások folytán** fellépő **egyensúlyok és folyamatok** tudományává vált.

James Watt (1736-1819) skót feltaláló

Fő feladata:

- a **változások** és átalakulások irányának és az egyensúlyi végállapot felé való törekvésének értelmezése, valamint
- az **egyensúlyt** és a hozzá vezető folyamatot befolyásoló tényezők felderítése.

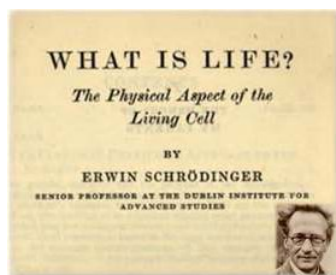


(A.L. Lavoisier 1743-1794)

“...respiration is nothing but a slow combustion of carbon and hydrogen...”



Rubner 1894-ben elsőként állította, hogy a termodinamika törvényei alkalmazhatók élő rendszerekre.



Fenomenologikus- és statisztikus termodinamika

Fő feladata: a kölcsönhatások folytán fellépő változások és átalakulások

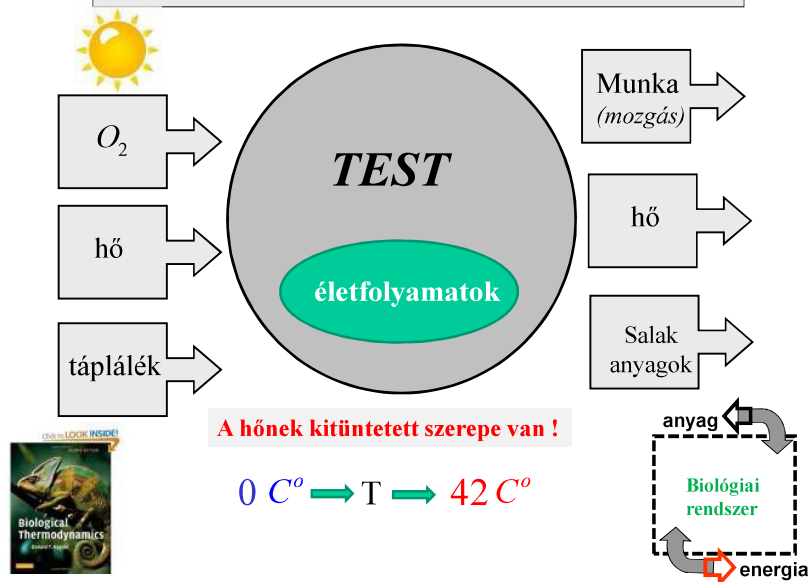
**irányának,
mozgató erőinek, és
befolyásoló tényezőinek**

felderítése.

Törvényei általánosíthatók

biológiai-, társadalmi-, gazdasági-, pénzügyi- és egyéb... rendszerekre.

BIOLÓGIAI TERMODINAMIKAI RENDSZER



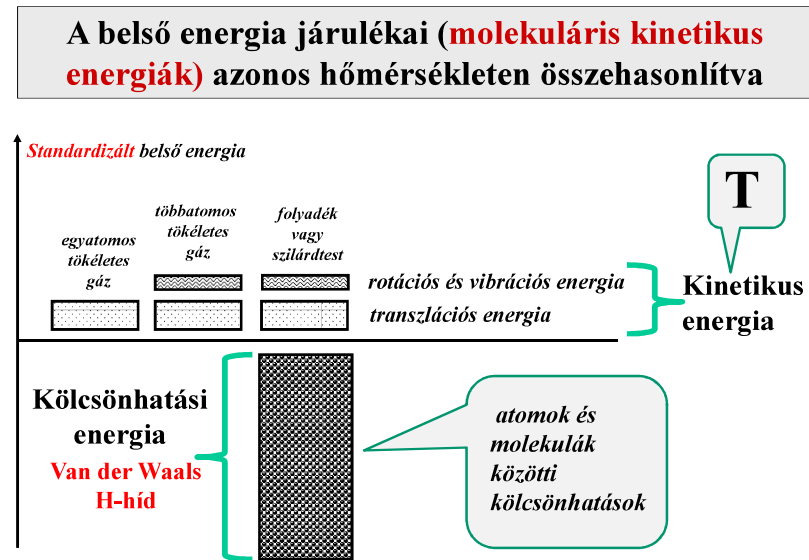
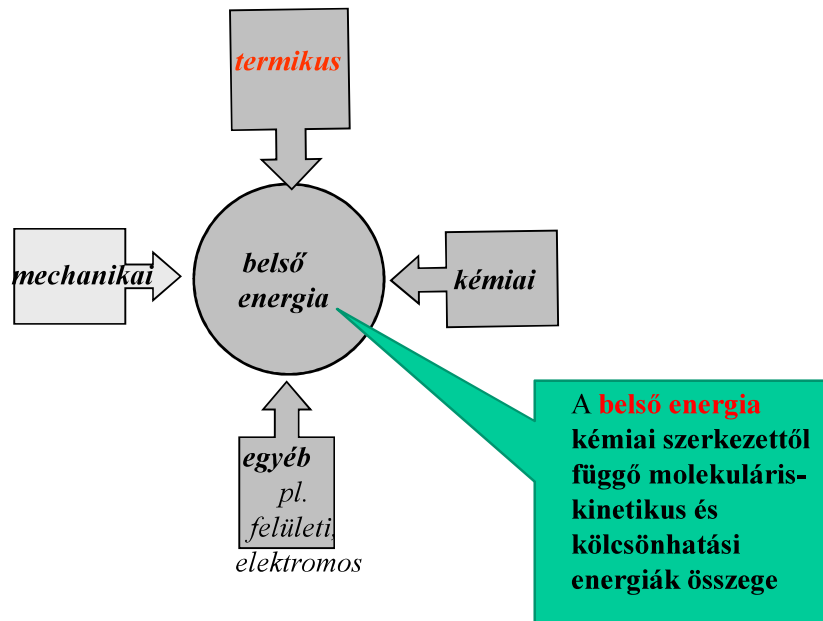
ENERGIA

helyzeti

kinetikus

belső

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



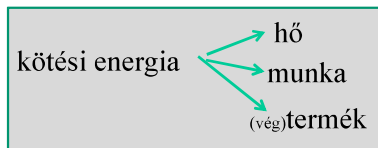
Néhány „üzemanyag” energia sűrűsége

anyag	Energia sűrűség [J/Kg]
ATP	$1,0 \cdot 10^5$
H_2 gáz 10^3 atm. nyomáson	$1,2 \cdot 10^8$
glicin	$6,5 \cdot 10^6$
zsír	$3,9 \cdot 10^7$
szénhidrát	$1,7 \cdot 10^7$
glükóz	$1,6 \cdot 10^7$

VISSZA A TERMODINAMIKÁHOZ

$$\Delta U = \underset{+}{\Delta(ME)} + \underset{-}{\Delta Q} + \underset{+}{\Delta U_{\text{tárolt}}} + \underset{-}{\Delta W_{\text{mech}}}$$

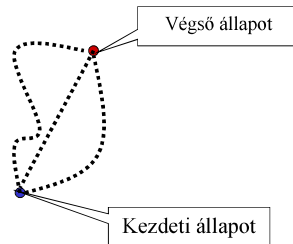
$$\Delta(ME) = 0 \implies \Delta U < 0$$



A belső energia **extenzív** mennyiség.

A belső energia **állapotfüggvény**.

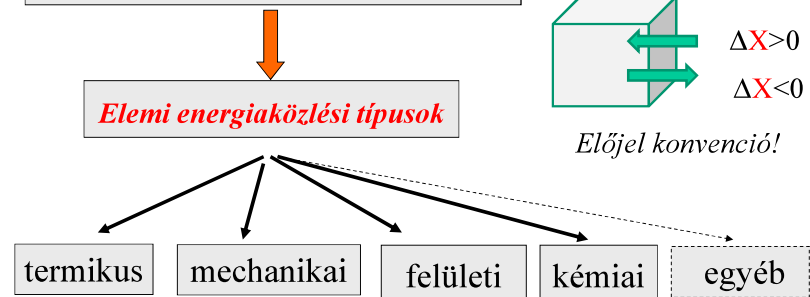
A belső energia **értékét nem ismerjük**.



A belső energia megváltozik,

- amikor változik a hőmérséklet,
- amikor változik a molekuláris vagy halmaz szerkezet,
- amikor változnak az intermolekuláris kölcsönhatások,
- amikor valamelyik elektronpálya gerjesztett állapotba kerül.

Belső energia megváltozása



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

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

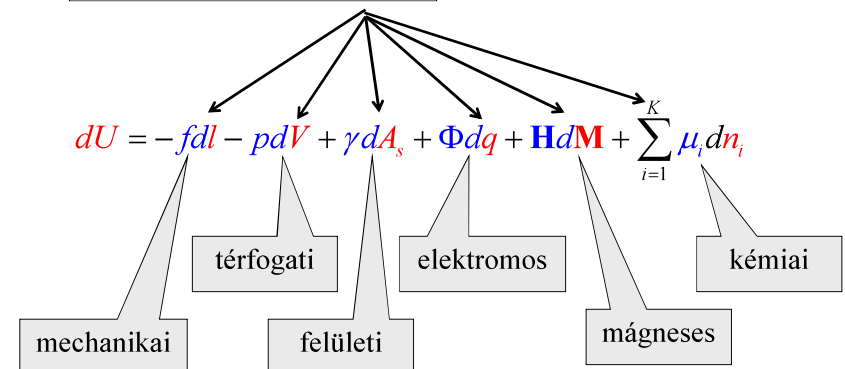
Minden egyes kölcsönhatáshoz tartozik egy-egy jellemző **intenzív** és **extenzív** mennyiség, melynek szorzata megadja a kölcsönhatáshoz tartozó elemi energiacsere.

$$dW_i = y_i \cdot dx_i$$

elemi energiacsere

$$dU = \sum_i dW_i = \sum_i y_i \cdot dx_i$$

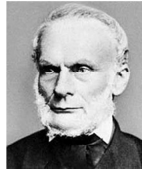
y : intenzív mennyiség
 x : extenzív mennyiség



És hol van a hőhatás ???

$y = T$ $x = ?$

$$dU = -pdV + \gamma dA_s + \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i + ?d?$$



Van a belső energiának egy olyan része, amely a többi extenzív mennyiségtől függetlenül is változhat. Ezt az "önmagában történő belső energiaváltozást" célszerű az elemi energia-cserékhez hasonlóan egy intenzív és egy extenzív mennyiség szorzataként felírni.

- termikus kölcsönhatás $dU_Q = dQ = TdS$

$$dU = -pdV + TdS + \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i + \dots +$$

$$\mu_i = \mu_{o,i} + RT \ln c_i$$

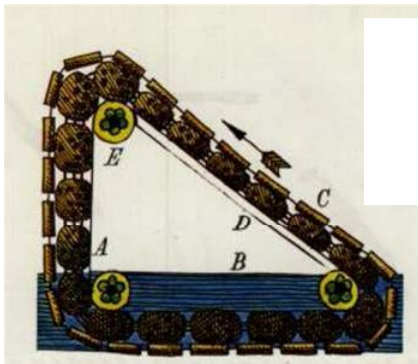
kémiai potenciál

entrópia

Az olyan gépeket, amelyek mechanikai munkát végeznének anélkül, hogy külső forrásból energiát fogyasztanának, **első fajú perpetuum mobile**-nek, vagy más néven **örökmozgónak** nevezzük. A termodinamika első főtételéből következik, hogy első fajú perpetuum mobile nem működhet.

A termodinamika első főtétele, maga az energia-megmaradás elve!

Egy szellemes perpetuum mobile, amelynek működését kizárja a termodinamika első főtétele.



A termodinamika I. főtétele

$$dU = TdS - pdV + \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i + \dots +$$

Az **energiamegmaradás törvényének** legáltalánosabb megfogalmazása.

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W_{\text{mech}} + \Delta W_{\text{kém}} + \dots + \Delta W_i$$

$$\Delta W_{\text{mech}} = \Delta U - \Delta Q - \sum_i \Delta W_i$$

Egy termodinamikai rendszer akkor képes munkavégzésre ($\Delta W_{\text{mech}} < 0$), ha a belső energiáját csökkenti ($\Delta U < 0$), vagy ha környezetéből hőt von el ($\Delta Q > 0$), vagy más formában energiát ($\Delta W_i > 0$) vesz fel.

A bio-termodinamika I. főtétele

tárolt energia
megváltozása

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W_{\text{mech}} + \Delta W_{\text{kém}}$$

metabolikus hő

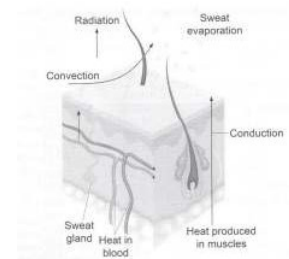
vesztesség

bio-szintézis

mechanikai munka

külső

belső



Termikus kölcsönhatások jellemzői: a hőmérséklet és az entrópia

$$\Delta Q = T \Delta S$$

- A **hőmérséklet** fogalom a hideg-, ill. melegérzetből fejlődött ki.
- Alapvető felismerés: **a hő és a hőmérséklet nem azonos.** (Joseph Black skót kémikus)
- Az első hőmérséklet-mérő készüléket **Galileo Galilei** alkotta meg.
- **Jean Rey** francia orvos megalkotta az első lázmérőt 1631-ben
- A mai hőmérsékletskálat **Anders Celsius**nak köszönhetjük (1742). A víz forráspontját 0 foknak vette, az olvadáspontját pedig 100 foknak.
- A 100 fokos hőmérsékleti skálát **Carl von Linne** fordította meg, úgy ahogy napjainkban is használjuk.



Megadhatjuk tetszőleges termodinamikai kölcsönhatásban álló elszigetelt rendszer entrópia változását.

$$dU = TdS - pdV + \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i + \dots +$$

$$dS = \frac{dU}{T} + \frac{p}{T} dV - \sum_{i=1}^K \frac{\mu_i}{T} dn_i + \dots +$$

$$dS = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) dU_1 + \left(\frac{p_1}{T_1} - \frac{p_2}{T_2} \right) dV_1 - \left(\frac{\mu_1}{T_1} - \frac{\mu_2}{T_2} \right) dn_1$$

Izoterm nyomás kiegyenlítődési folyamatnál :

$$\text{ha } p_1 > p_2 \text{ akkor } \frac{p_1}{T} - \frac{p_2}{T} > 0 \text{ és } dV_1 > 0 \Rightarrow dS > 0$$

$$\text{ha } p_1 < p_2 \text{ akkor } \frac{p_1}{T} - \frac{p_2}{T} < 0 \text{ és } dV_1 < 0 \Rightarrow dS > 0$$

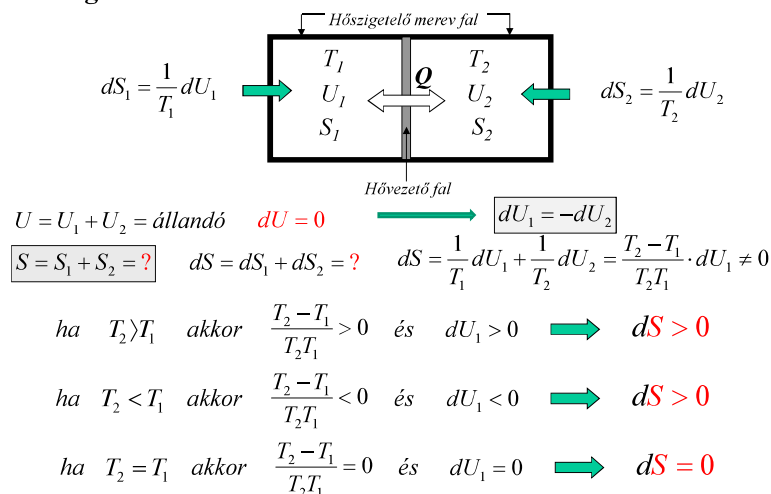
$$\text{ha } p_1 = p_2 \text{ akkor } \frac{p_1}{T} - \frac{p_2}{T} = 0 \text{ és } dV_1 > 0 \Rightarrow dS = 0$$

Elszigetelt rendszerben a hőmérséklet és a nyomás kiegyenlítődési folyamatok során az entrópia növekszik, egyensúlyban eléri a maximális értékét.

Az entrópia **nem megmaradó** extenzív mennyiség!

Elszigetelt rendszer

Az energia megmaradó mennyiség



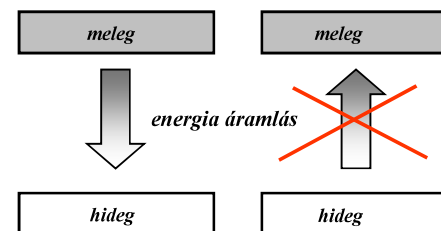
A hőcsere következtében a rendszer teljes entrópiája növekszik!

A termodinamika II. főtétele

Elszigetelt rendszerben a önként lejátszódó (kiegyenlítődési) folyamatok során az entrópia növekszik.

Lehetetlen olyan periodikusan működő gépet szerkeszteni, amely egyetlen hőtartályból hőt von el, és azt teljes egészében munkává alakítja.

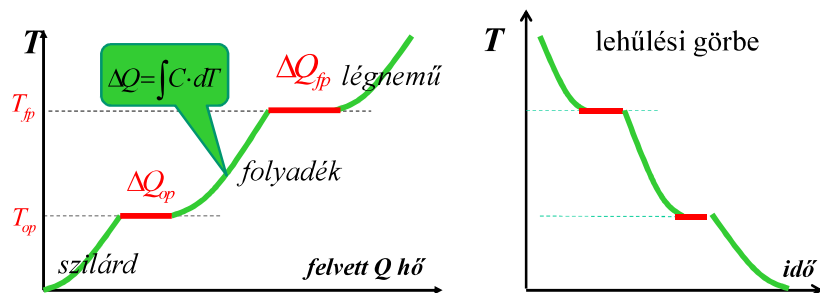
Másodfajú perpetuum mobile működése nem ellenkezik az első főtételel, de megvalósítását a termodinamika második főtétele kizárja.



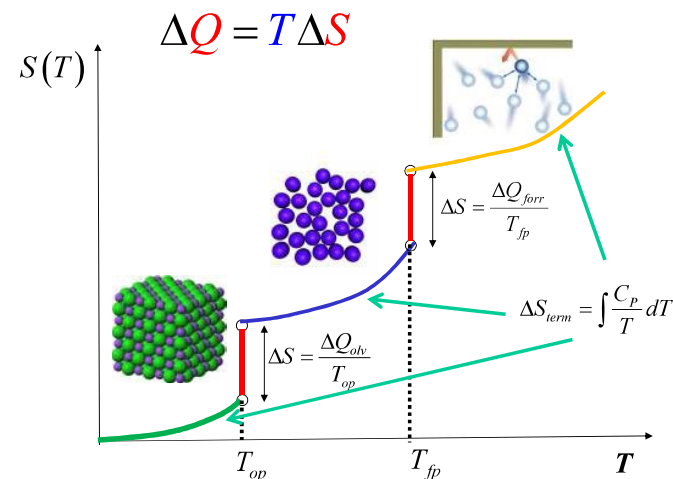
Termikus kölcsönhatások

Hő hatására

- \rightarrow a hőmérséklet változik (1)
- \rightarrow a hőmérséklet nem változik (2)
látens hő!



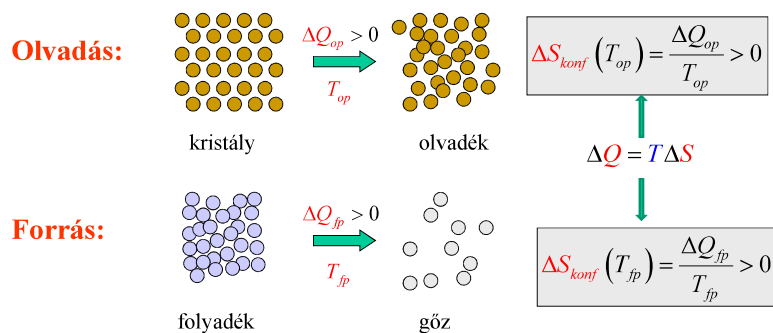
Az *entrópia* függése a hőmérséklettől



entrópia

- \rightarrow **termikus entrópia** (a hőmérséklet változik)
- \rightarrow **konfigurációs entrópia** (a hőmérséklet *nem* változik)

Equation: $\Delta S = \Delta S_{term} + \Delta S_{konf}$



Az állandó hőmérsékleten lejátszódó (fázis)átalakulás során az **entrópia a rendezetlenség növekedésével együtt nő.**

Az entrópia a molekuláris rendezetlenség mértéke

Entrópia növekedéssel járó folyamatok



Entrópia a rendezetlenség mértéke?

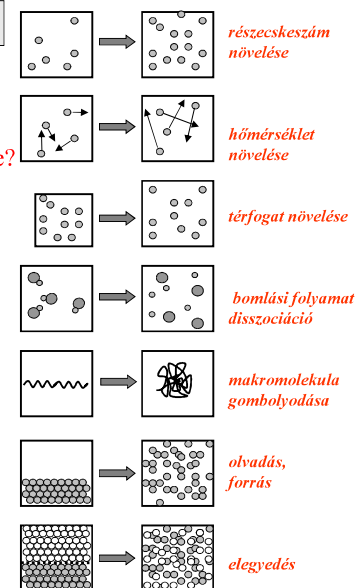
IGEN!

Boltzmann összefüggés:

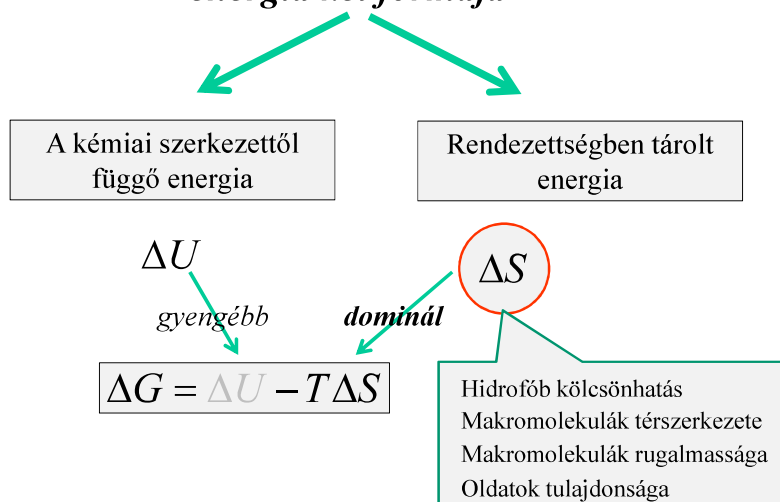
$$S = k_B \ln W$$

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

termodinamikai valószínűség: $W \gg 1$




A termodinamika II. főtétele alapján a biológiai energia két formája




Minél bonyolultabb szerkezetű egy molekula, annál nagyobb a standard entrópiája.


Néhány anyag standard entrópiája 298 K hőmérsékleten
J/molK egységben



Methane, CH₄
S° = 186.3 J mol⁻¹ K⁻¹



Ethane, C₂H₆
S° = 229.6 J mol⁻¹ K⁻¹



Propane, C₃H₈
S° = 270.3 J mol⁻¹ K⁻¹

szilárd anyag		folyadék		gáz	
C gyémánt	2,4	benzol	173,3	benzol gőz	269,3
C grafit	5,7	Víz	69,9	vízgőz	188,8

Substance	S°, J/mol-K
Gases	
H ₂ (g)	130.6
N ₂ (g)	191.5
O ₂ (g)	205.0
H ₂ O(g)	188.8
NH ₃ (g)	192.5
CH ₃ OH(g)	237.6
C ₆ H ₆ (g)	269.2
Liquids	
H ₂ O(l)	69.9
CH ₃ OH(l)	126.8
C ₆ H ₆ (l)	172.8
Solids	
Li(s)	29.1
Na(s)	51.4
K(s)	64.7
Fe(s)	27.23
FeCl ₃ (s)	142.3
NaCl(s)	72.3

A termodinamika III. főtétele

Tiszta kristályos anyagok entrópiája nulla az abszolút zérus ponton:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(T) = 0$$

Nernst kísérleti úton, Planck pedig az entrópia statisztikus értelmezése alapján fogalmazta meg.



A III. főtétele lehetővé teszi **abszolút entrópia skála** bevezetését

$$S(T) = \int_0^T \frac{C_p}{T} dT + \Delta S_{konfig}$$



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

Standard entrópia

A belső energia adott körülmények között hasznosítható része:

Izobár eset: **H entalpia**

Izoterm eset: **F szabadenergia**

Izoterm-izobár eset: **G szabadentalpia**

ENTALPIA

Csak termikus és mechanikai kölcsönhatást vizsgáljunk

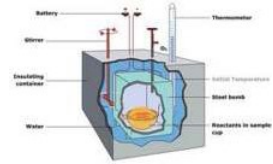
$$dU = TdS - pdV \quad \text{ha } p=\text{állandó, akkor } dU = TdS - d(pV)$$

$$dU + d(pV) = d(U + pV) = TdS$$

$$dH = d(U + pV) = TdS \quad \Rightarrow \quad \text{hő}$$

$$H = U + pV$$

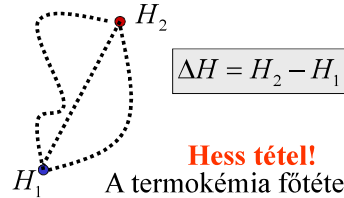
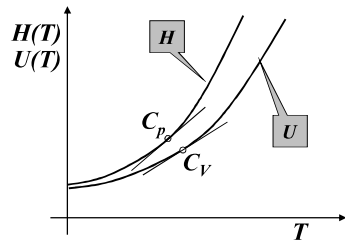
A H entalpia az U belső energiának izobár hőközléssel hasznosítható része.



$$H = U + pV$$

Az entalpia **extenzív** mennyiség.

Az entalpia **állapotfüggvény**.



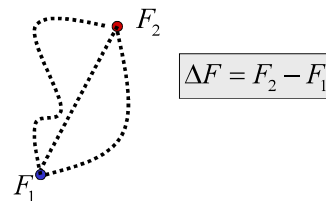
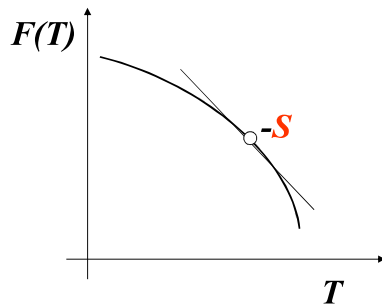
Nem függ tehát a reakcióhő nagysága a részfolyamatok sorrendjétől

A szabadenergia függvény matematikai tulajdonságai

$$F = U - TS$$

A szabadenergia **extenzív** mennyiség.

A szabadenergia **állapotfüggvény**.



A szabadenergia **nem megmaradó** mennyiség!

A szabadenergia

Csak termikus és mechanikai kölcsönhatást vizsgálunk

$$dU = TdS - pdV \quad \text{ha } T=\text{állandó, akkor } dU = d(TS) - pdV$$

$$dA = dU - d(TS) = -pdV = \Delta W_{\text{mech}}$$

$$dF = d(U - TS) = -pdV = \Delta W_{\text{mech}}$$

mechanikai munka

$$F = U - TS$$

Az F szabadenergia az U belső energiának izoterm munkavégzéssel hasznosítható része.

A szabadentalpia

Termikus, mechanikai és kémiai kölcsönhatásokat vizsgálunk

$$\Delta U = T\Delta S - p\Delta V + \sum_{i=1}^K \mu_i \Delta n_i$$

$$dU = -pdV + TdS + \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i + \dots +$$

$$\text{ha } T \text{ és } p=\text{állandó, akkor } dU = d(TS) - d(pV) + \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i$$

$$dG = dU + d(pV) - d(TS) = \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i$$

kémiai munka

$$dG = d(U + pV - TS) = \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i$$

$$dG = d(H - TS) = \sum_{i=1}^K \mu_i dn_i$$

$$G = H - TS$$

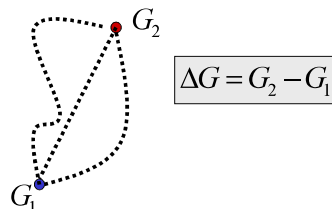
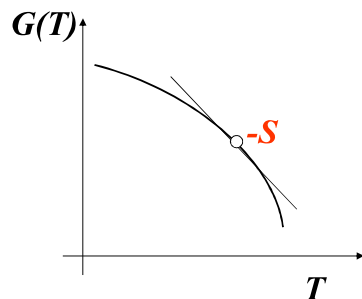
A G szabadentalpia az U belső energiának kémiai folyamatokkal hasznosítható része.

A szabadentalpia függvény matematikai tulajdonságai

$$G = H - TS$$

A szabadentalpia **extenzív** mennyiség.

A szabadentalpia **állapotfüggvény**.



A szabadentalpia **nem megmaradó** mennyiség!

Környezeti hatások

Környezet	Karakterisztikus Függvény és változói	A függvény neve	A függvény definíciója
elszigetelt	$S(U, V, n)$	entrópia	
zárt	$U(S, V, n)$	belső energia	$U = TS - pV +$
izobár	$H(S, p, n)$	entalpia	$H = U + pV$
izoterm	$F(T, V, n)$	szabadenergia	$F = U - TS$
izoterm- izobár	$G(T, p, n)$	szabadentalpia	$G = H - TS$

Önként lejátszódó folyamatok iránya és hajtóereje

A fizikai kémiai folyamatok spontán lejátszódásának nem szükséges feltétele a belső energia minimumra való törekvése!

Egy példa: A jég olvadása. 0 C hőmérséklet közelében a víz belső energiája nagyobb, mint a jégé, ennek ellenére az 1 C-os hőmérsékletű jég légköri nyomáson spontán megolvad. Az olvadást $+4,2 \text{ kJ/mol}$ belsőenergia növekedés kíséri.

SZABADENERGIA

Csak termikus és mechanikai kölcsönhatást vizsgáljunk!



$$F = U - TS$$

$$\Delta F = \Delta U - T \Delta S = W_{\text{mech}}$$

Az F szabadenergia az U belső energiának izoterm munkavégzéssel hasznosítható része.

SZABADENTALPIA

↓ Termikus, mechanikai és kémiai kölcsönhatásokat vizsgálunk

$$G = H - TS$$

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

A G szabadentalpia az U belső energiának kémiai folyamatokkal hasznosítható része.

Önként lejátszódó folyamatok iránya és hajtóereje

A termodinamikai folyamatok spontán lejátszódásának nem szükséges feltétele a belső energia minimumra való törekvése!

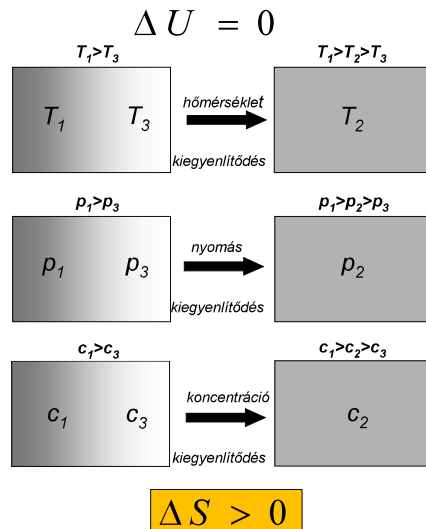
Egy példa: A jég olvadása. 0 C hőmérséklet közelében a víz belső energiája nagyobb, mint a jégé, ennek ellenére az 1 C-os hőmérsékletű jég légköri nyomáson spontán megolvad. Az olvadást $+4,2 \text{ kJ/mol}$ belsőenergia növekedés kíséri.

Folyamatok iránya Elszigetelt rendszerben $\Delta S > 0$

$\Delta F = \Delta U - T\Delta S$ Izoterm rendszerben $\Delta F < 0$

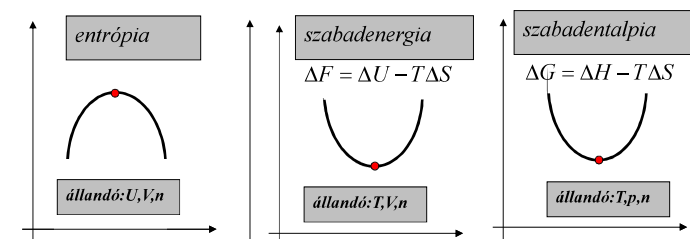
$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ Izoterm - izobár rendszerben $\Delta G < 0$

Elszigetelt rendszerben önként végbemenő folyamatok.



A termodinamikai egyensúly feltétele

karakterisztikus függvény	környezeti kölcsönhatás	az egyensúlyhoz tartozó szélsőérték	önként lejátszódó folyamat során
$S(U, V, n)$	elszigetelt	maximum	$\Delta S > 0$
$F(T, V, n)$	termikus	minimum	$\Delta F < 0$
$G(T, p, n)$	Mechanikai és termikus	minimum	$\Delta G < 0$



**Elszigetelt rendszerben a önként lejátszódó folyamatok során
az entrópia növekszik.**

Entrópia a rendezetlenség mértéke.



evolúció  termodinamika II. főtétele