



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

F1190 Úvod do biofyziky
Masarykova Univerzita
Podzimní semestr 2023

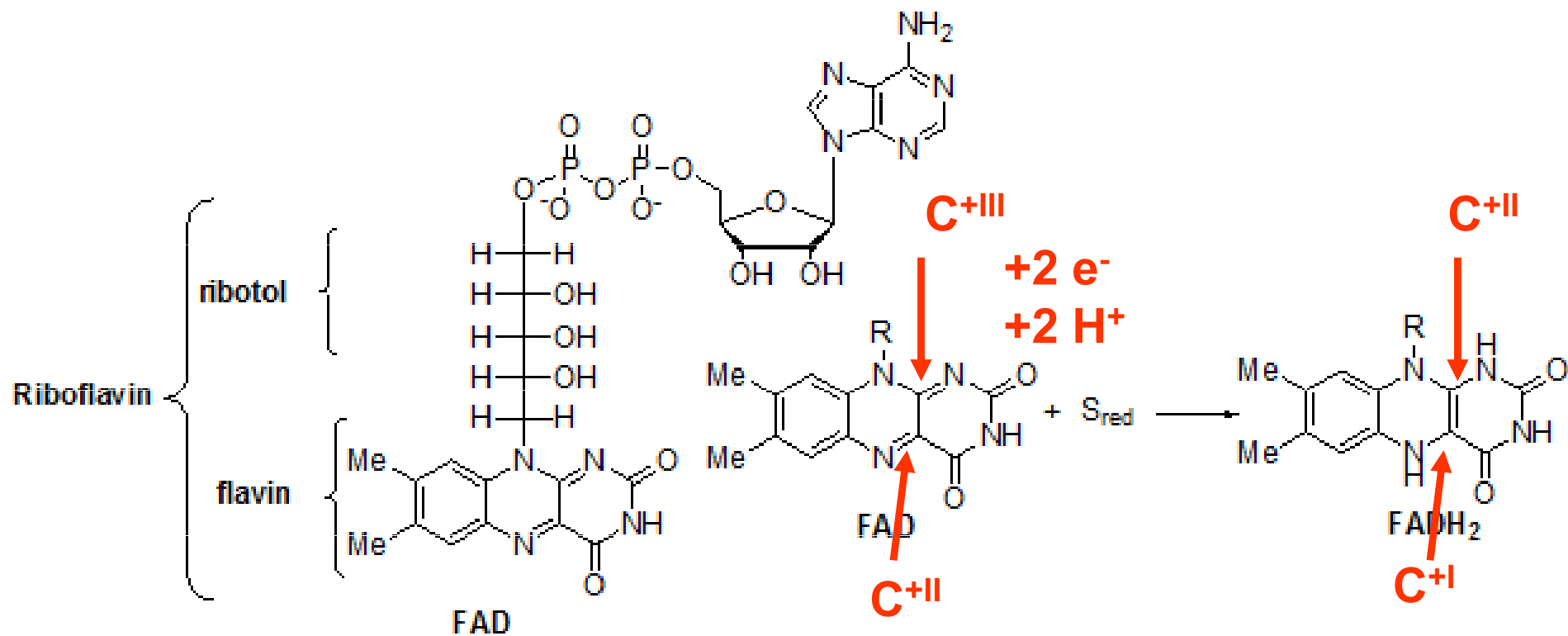
Řešení ke cvičením z 12.10.2023

Vyučující:

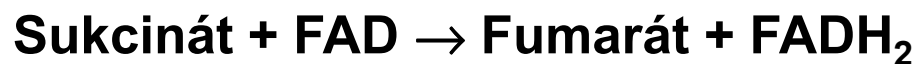
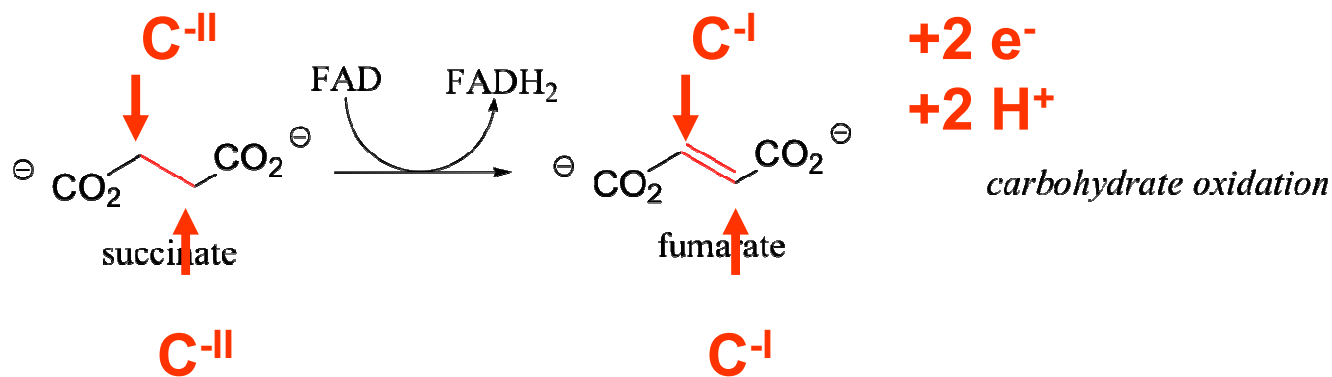
Prof. Jiří Kozelka, Biofyzikální Laboratoř, Ústav fyziky kondenzovaných látek, PŘF MU, Kotlářská 2, kozelka.jiri@gmail.com

Cvičení 1

Jedním z nejrozšířenějších kofaktorů oxidačně-redukčních enzymů je Flavin-Adenin-Dinukleotid (FAD)



Úkol: vyčíslete reakci sukcinátu s FAD na fumarát a FADH₂.



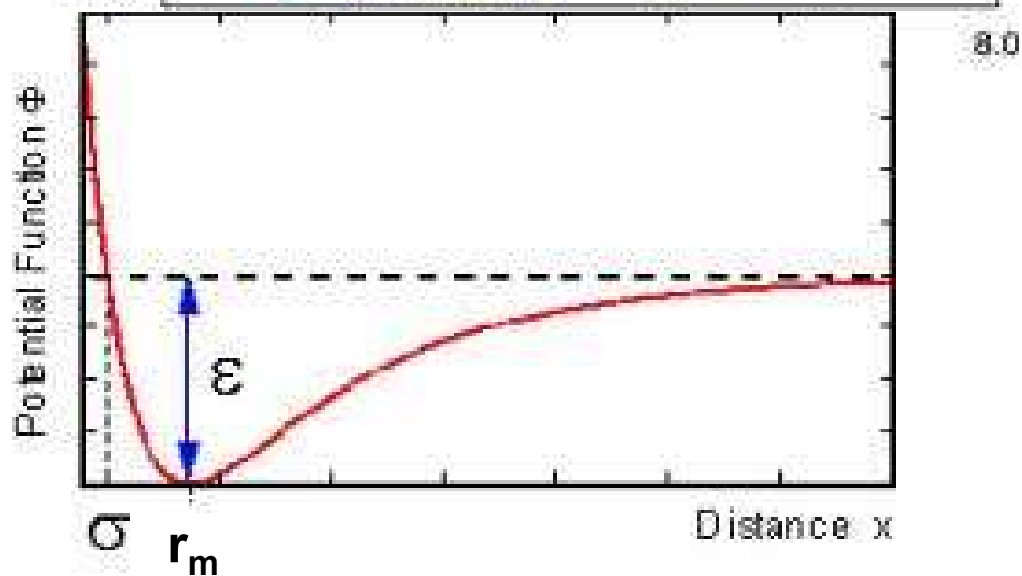
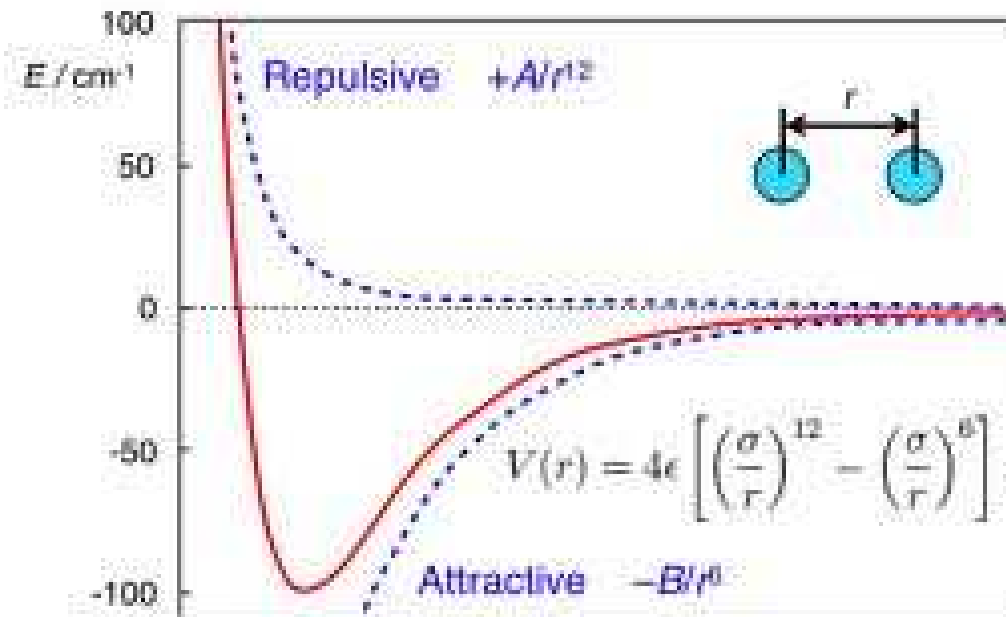
Lennard-Jonesův potenciál

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$$

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Cvičení 1: vyjádřete ε a σ pomocí parametrů A a B

Cvičení 2: odvod'te vzorec pro $V(r)$ pomocí parametrů ε a r_m vyjádřete A a B pomocí parametrů ε a r_m



$\sigma : r(V = 0)$

$r_m : r(V_{\min})$

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$$

pro $r = r_m$ platí:

$$\frac{dV}{dr} = -12 \frac{A}{r^{13}} + 6 \frac{B}{r^7} = 0$$

$$B = 2 \frac{A}{r_m^6}$$

$$r_m = \sqrt[6]{\frac{2A}{B}}$$

**Pozor, ε je kladná hodnota
(hloubka energ. minima)**

$$-\varepsilon = \frac{A}{r_m^{12}} - \frac{B}{r_m^6} = -\frac{B^2}{4A}$$

$$0 = \frac{A}{\sigma^{12}} - \frac{B}{\sigma^6}$$

$$\sigma = \sqrt[6]{\frac{A}{B}}$$

$$A = B\sigma^6 = \frac{B^2}{4\varepsilon}$$

$$B = 4\varepsilon\sigma^6$$

$$A = 4\varepsilon\sigma^{12}$$

$$\varepsilon = \frac{B^2}{4A}$$

$$B = \sqrt{4A\varepsilon} = 2 \frac{A}{r_m^6}$$

$$4\varepsilon = 4 \frac{A}{r_m^{12}}$$

$$A = \varepsilon r_m^{12}$$

$$B = 2\varepsilon r_m^6$$

$$V(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 \right]$$