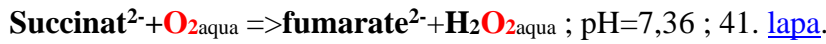


KATALĀZE nepieciešams **dzīvības** dzinējs reakciju labvēlīgam, simts procentīgam 100% iznākumam •



$$\Delta G_{Hess} = \Delta G^{\circ}_{H_2O_2} + \Delta G^{\circ}_{fumarate} - \Delta G^{\circ}_{O_2} - \Delta G^{\circ}_{Succinat} = -151,549 - 519,4688 - (-522,414 + 16,4) = -165 \text{ kJ/mol};$$

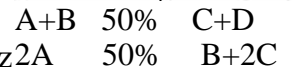
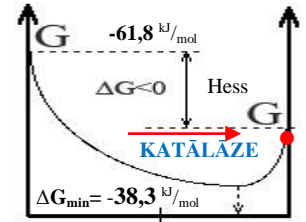
$$\Delta G_{Hess} = \Delta H_{Hess} - T \cdot \Delta S_{Hess} = -48,16 - 298,15 \cdot 0,0458 = -61,815 \text{ kJ/mol eksoergiski}$$

$$\Delta G_{min} = \Delta G_{eq} = (E^{\circ}_{Red} - E^{\circ}_{Ox}) \cdot F \cdot n = (0,2512 - 0,4495) \cdot 96485 \cdot 2 = (-0,1983) \cdot 96485 \cdot 2 = -38,3 \text{ kJ/mol};$$

K_{eq} = exp(-ΔG_{eq}/R/T) = exp(382565,95/8,3144/298,15) = 5057721 favored equilibrium
 Neaizstājamo nepiesātināto taukskābju pagarināšana C20:4 un -CH₂-CH₂- etil grupas

dehidrogenēšana par cis dubultsaiti **H>C=C<H** peroksisomās ΔG_{Hess} = -61,8 kJ/mol ir negatīva, bet minimizējas sasniedzot līdzsvara maisījumu ΔG_{min} = ΔG_{eq} = -38,3 kJ/mol .

KATALĀZE kompleksajās reakcijās secīgi veicina neaizstājamo nepiesātināto taukskābju



• 100% iznākumu: $K_{eq} = 5057721 = \frac{[Fumarate^{2-}] \cdot [H_2O_2]}{[Succinate^{2-}] \cdot [O_2]}$ **KATALĀZE**

nullei **[H₂O₂] = 0 mol/liter** un procesa ātrumu limitē vienīgi enzīms dehidrogenāze. Atraktori, enzīmu reaktivitāte ir nepieciešami Brauna molekulārie dzinēji neatgriezeniskai homeostāzei, izdzīvošanai un evolūcijai.

Liela ātruma protolīze aktivē no **G_{H2O} + G_{HOOH} = 0 + 274,5 = 274,5 kJ/mol** līdz **G_{H3O+} + G_{HOO-} = 22,4 + 328 = 350,4 kJ/mol**;

1) Protolīze HOOH + H₂O ⇌ H₃O⁺ + HOO⁻ pKa = 11,75 rada HOO⁻ >< ⁻OOH sadursmi ar dismutēšanos.

2) Liela aktivācijas enerģiju Ea = 79000 J/mol sadursmē HOO⁻ >< ⁻OOH ar lēnu ātruma $\vec{k} = 1,416 \cdot 10^{-16} \text{ M}^{-2} \text{ s}^{-1}$ konstanti disproporcionē ⁻OOH oksidējot atomus par O₂ aqua un otros atomus ⁻OOH reducē par 2 OH⁻ joniem,

3) kuri neitralizējas ar hidroksonija joniem par ūdeni: 2OH⁻ + 2H₃O⁺ => 2H₂O + 2H₂O. Summā producē



1) Reakcija sākas ar protolīzi , tad 2) sadursmē disproporcionē OO atomus un 3) beigās neitralizējas.

Negatīvā jona sadursmei ar pozitīvo **HOO⁻ > Fe³⁺** ir nepieciešami zema **Ea = 29 J/mol** aktivācijas enerģija. **His74**, Asn147 protonēšana ievērojami palielina ātruma konstanti **KATALĀZĒ** 30 miljons reižu kopā ar ģeometrisko faktoru **A uzlabojot līdz A => 0,131:**



Protolīze aktivē aktīvo pārejas kompleksu **skābeklis + ūdens + siltums + KATALĀZE**

Negatīvie joni sadursmē ar pozitīvo dzelzs **Fe³⁺** jonu dzīvības resursus veido 30 miljons reižu ātrāk.

Bioķīmiskais katalizators-enzīms katalāze-CATALĀZE pēc Kembridžas universitātes profesors Alans Feršts

uzrāda reaktivitāti: $\vec{v}_{enz} = k_{cat}/K_M \cdot [E] \cdot [H_2O_2] = 3,6 \cdot 10^7 \cdot [E] \cdot [H_2O_2]$, jo **HOO⁻ => Fe³⁺** sadursmes aktivācijas

enerģija **Ea = 29 J/mol** ir neliela. Parasti katalāzes koncentrācija ir neliela **[E] = 10⁻⁸ M** un $\vec{v}_{enz} = 0,36 \cdot [H_2O_2] \text{ s}^{-1}$.

Katalāzes aktivācijas enerģija un ģeometriskais faktors **A = 0,1311** aktīvo sadursmju daļa ir 0,988 un ātruma konstantes vērtība ir 0,1296 M⁻¹s⁻¹ , 98,8% sadursmes producē **O₂ aqua + 2H₂O + Q** ar reakcijas ātruma konstantes

vērtību : $\vec{k} = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}} = 0,131 \cdot e^{-\frac{29}{8,314 \cdot 298}} = 0,131 \cdot 0,988 = 0,1296 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$, $\vec{v} = \vec{k} \cdot [H_2O_2]^2 = 0,1296 \cdot [H_2O_2]^2 \text{ Ms}^{-1}$.

Bez katalizatora jonu sadursmē **HOO⁻ >< ⁻OOH** aktivācijas enerģija **Ea = 79000 J/mol** ir liela un **A = 0,01** ir ģeometriskais faktors. Tas izveido Arēnusa ātruma (velocity) konstanti izteiksmē nenozīmīgi mazu:

$$\vec{k} = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}} = 0,01 \cdot e^{-\frac{79000}{8,314 \cdot 298}} = 0,01 \cdot 1,419 \cdot 10^{-14} = 1,419 \cdot 10^{-16} \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1} .$$

$$\vec{v} = \vec{k} \cdot [H_2O_2]^2 = 1,419 \cdot 10^{-16} \cdot [H_2O_2]^2 \text{ Ms}^{-1} ; \text{if } [H_2O_2] = 1 \text{ M} ; \sqrt{\vec{v}} = \sqrt{\vec{k}} \cdot [H_2O_2] = 1,191 \cdot 10^{-8}$$

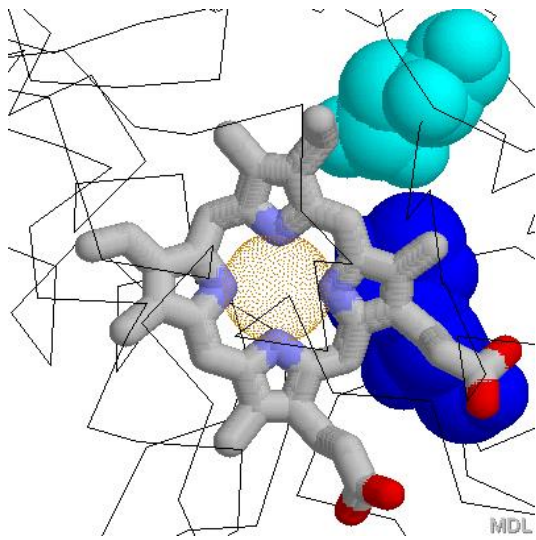
un $\sqrt{\vec{v}} = \frac{CAT \vec{v}}{\sqrt{\vec{k}}} \cdot [H_2O_2] = 0,36 \cdot [H_2O_2]$; $\frac{CAT \vec{v}}{\sqrt{\vec{k}}} = \frac{0,36}{1,19 \cdot 10^{-8}} = (4.) 30 \cdot 10^6$ reizes lielāka ātruma konstante.

$$\Delta G_{eqStandard} = (E^{\circ}_{H_2O_2} - E^{\circ}_{H_2O_2Ox}) \cdot F \cdot n = (0,4495 - 1,6855) \cdot 96485 \cdot 2 = (-1,1845) \cdot 96485 \cdot 2 = -238,5 \dots \text{ kJ/mol} ;$$

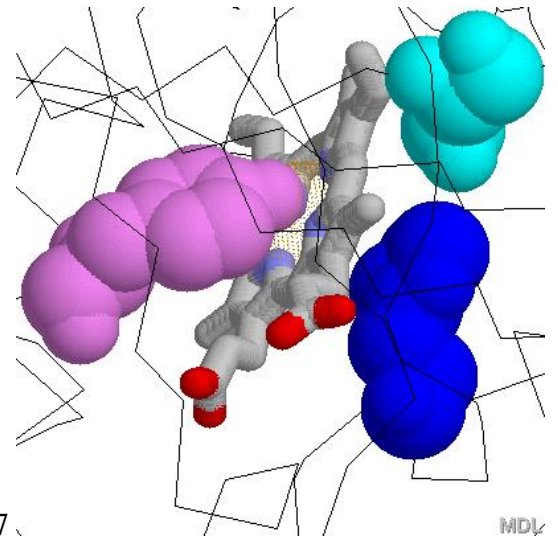
$$\Delta G_{HessAlberty} = G_{O_2} + 2G_{H_2O} - 2G_{H_2O_2} = 330 + 2 \cdot (0) - (2 \cdot 284) = -238 \dots \dots \text{ kJ/mol} ; \text{Alberty}$$

Absolūtā potenciālu skala sakrīt ar Alberty absolūto brīvās enerģijas skalu.

$$\frac{[O_2]_{aqua} \cdot [H_2O]^2}{[H_2O_2]_{aqua}^2} = K_{eqStandard} = K_{H_2O_2} = \exp(-\Delta G_{eqStandard}/R/T) = \exp(238500/8,3144/298,15) = 10^{41,8} \dots \dots$$

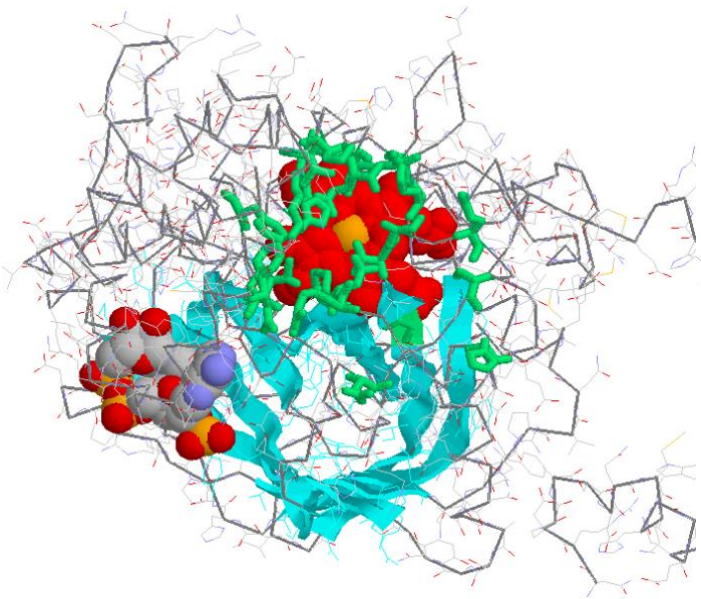


MDL Asn147, His74,

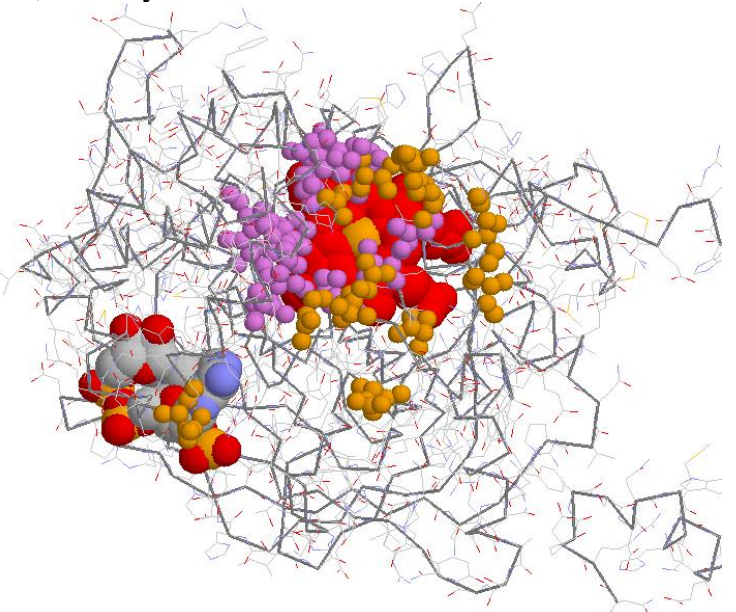


Tyr357,

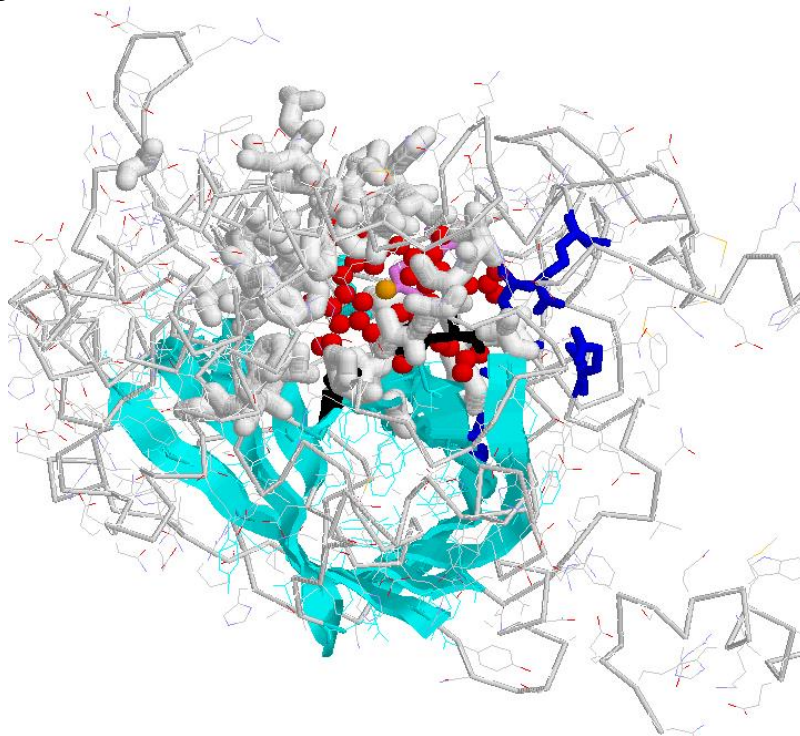
MDL



Piltuve1.jpg



PiltuveHydroPhylPhob.jpg

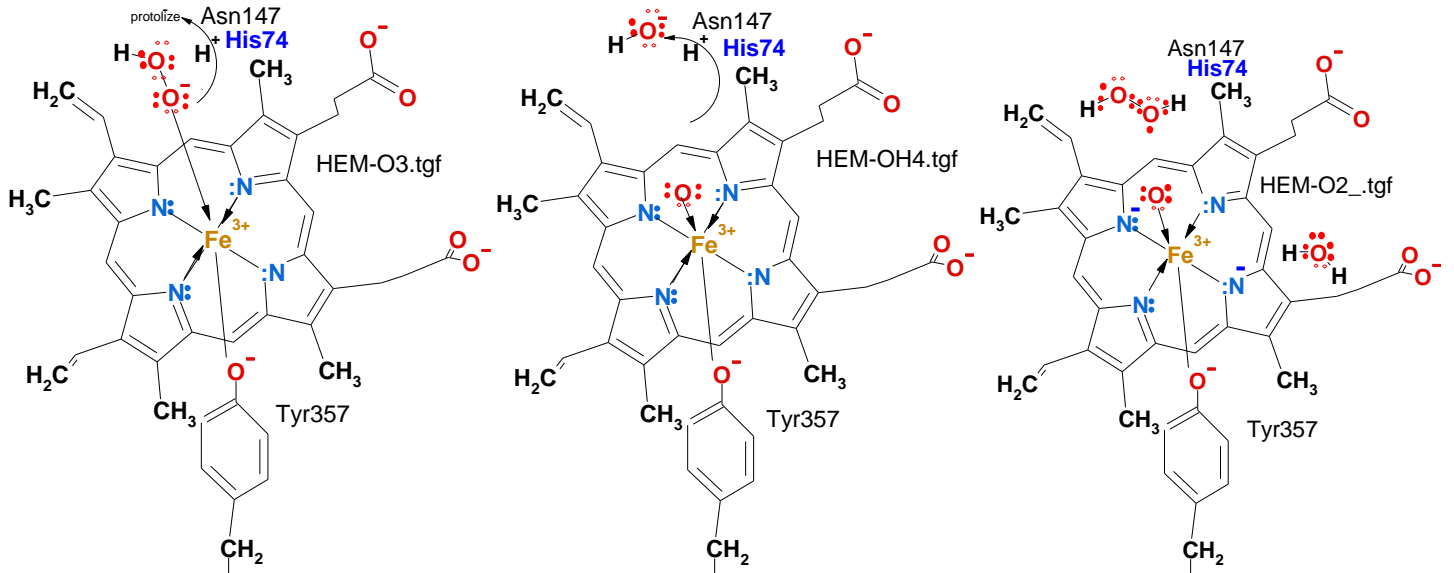


PiltuveHydroPhylPhob.jpg

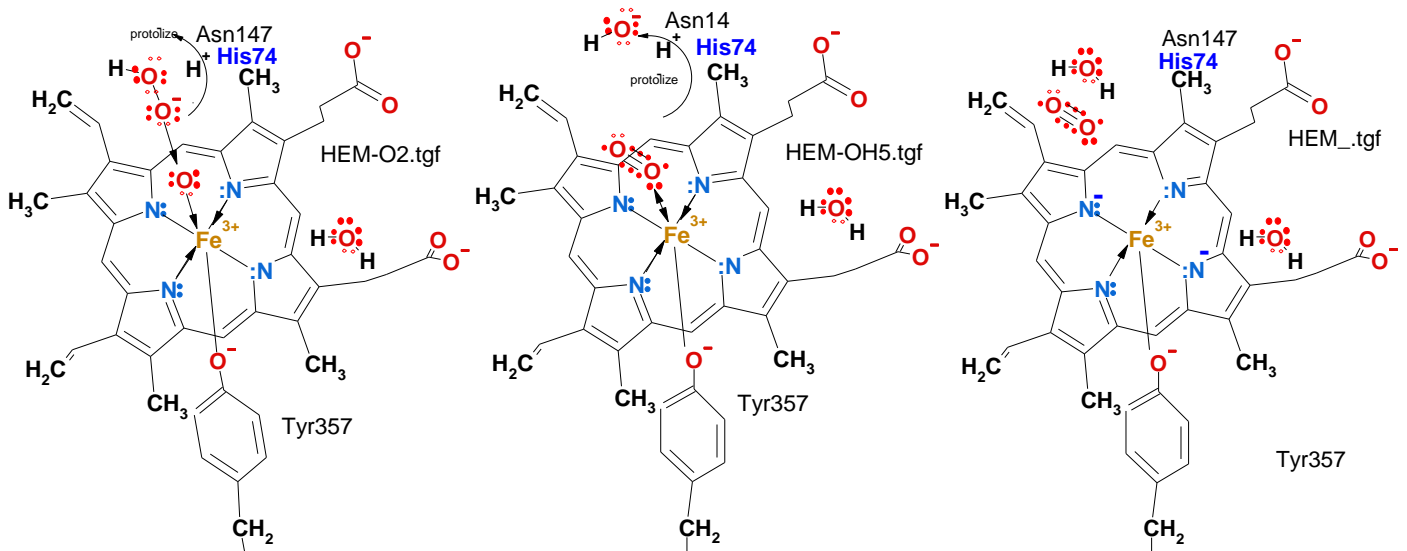
KATALĀZES piltuve ar dzelzs(III) **Fe(III)** jonu koordinācijas centrā
 Padziņinātas Studijas hromo proteīna [KATALĀZES hēma kabatiņas](#) aktīvajā centrā

Eksperimentālā pētījuma studiju protokols:

Skābekli oksidē sadursmē ar dzelzs atomu Ox **H-O-Fe(IV)** reducējas otrs skābekļa atoms **HO⁻**



Hēma kabatiņa ir hidrofoba ar 31 nepolārām aminoskābēm - patvalīga oksidēšanās-reducēšanās nedarbojas: Val72, Val73, Ala75, Val115, Ala116, Pro128, Gly130, Val145, Gly146, Phe153, Ile154, Ala157, Leu159, Phe160, Pro161, Phe163, Ile164, Leu198, Leu298, Ala332, Phe333, Pro335, Met349, Leu350, Gly352, Ala356, Pro358, Ala434



dismutēšanas reakciju mehānisma soļos deprotonējot peroksīdu un protonējot **His74**, Asn174 radot negatīvi lādēto anjona skābekļa atoma sadursmī aktīvajā centrā ar pozitīvo dzelzs atoma lādiņu **Fe(III)-O-Tyr357-E**:

peroksīda deprotonēšanā sadursmē KATALĀZES aktīvajā centrā ar **Fe(III)-O-Tyr357-E**!

1. $\text{H-O-O-H}_{\text{protolysis}} + \text{His74} + \text{Fe(III)-O-Tyr357-E} \Rightarrow \text{H}^+ - \text{His74}_{\text{protonate}} + \text{HOO}^{\cdot} \rightarrow + \text{Fe(III)-O-Tyr357-E} \dots\dots\dots$
2. $\text{H}^+ \text{His74}_{\text{protonation}} + \text{HOO}^{\cdot} \rightarrow + \text{Fe(III)-O-Tyr357-E} \Rightarrow \text{HO}^{\cdot}_{\text{Red}} + \text{H}^+ \text{His74}_{\text{protonate}} + \text{OxO-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \dots\dots\dots$
3. $\text{HO}^{\cdot}_{\text{Red}} + \text{H}^+ - \text{His74}_{\text{protonate}} + \text{OxO-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \Rightarrow \text{RedH}_2\text{O} + \text{His74} + \text{OxO-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \dots\dots\dots$
4. $\Rightarrow \text{H-O-O-H}_{\text{protolysis}} + \text{Asn147} + \text{O-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \Rightarrow \text{H}^+ \text{Asn147} + \text{HOO}^{\cdot} \rightarrow + \text{O-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \dots\dots\dots$
5. $\text{H}^+ \text{Asn147} + \text{HOO}^{\cdot} \rightarrow + \text{O-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \Rightarrow \text{HO}^{\cdot}_{\text{Red}} + \text{H}^+ \text{Asn147} + \text{OxO-O-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \dots\dots\dots$
6. $\Rightarrow \text{HO}^{\cdot}_{\text{Red}} + \text{H}^+ \text{Asn147} + \text{OxO-O-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \Rightarrow \text{RedH}_2\text{O} + \text{Asn147} + \text{OxO-O-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \dots\dots\dots$
7. $\text{RedH}_2\text{O} + \text{OxO-O-Fe(IV)-O-Tyr357-E} \Rightarrow \text{RedH}_2\text{O} + \text{OxO=O} + \text{Fe(III)-O-Tyr357-E} \dots\dots\dots$

Summā: $2\text{H}_2\text{O}_2 + \text{CAT} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HOO}^{\cdot} \rightarrow \text{Fe(III)} \leftarrow \text{OOH} + \text{H}_3\text{O}^+ \rightarrow \text{O}_{2\text{aqua}} + 2\text{H}_2\text{O} + \text{Q}_{\text{exothermic}} + \text{CAT}$

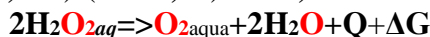
Protolīze aktīvē aktīvo pārejas kompleksu skābeklis+ ūdens+ siltums+ KATALĀZE

1. Sadursmē oksidējas skābekļa atoms un deprotonējas: OxO-Fe(III) (OxO=O) un H⁺-His74, Asn174 ;
2. reducējas otrs skābekļa atoms par hydroksīda anjonu HO⁻Red un neitralizējas protonējot par RedH₂O.

Liela ātruma protolīze peroksīda reducēšana un oksidēšana - dismutēšana.

Aprēķināt ΔH_{Hess} , ΔS_{Hess} , ΔG_{Hess} . Reakcija ir **eksotermiska**, **atermiska**, **endotermiska**? Peroksīda $2H_2O_2 \rightarrow 2H_2O + O_2$ pārvēršanās par $O_{2(aq)} + 2H_2O + Q$, lietojot tabulas datus! Miniet vai reakcija būs **eksoerģiska** vai **endoerģiska**!

$$\Delta G_H = \Delta G^\circ_{O_2} + 2\Delta G^\circ_{H_2O} - 2\Delta G^\circ_{H_2O_2} = 16,40 + 2*(-151,549) - (2*(-48,39)) = -189,9 \text{ kJ/mol eksoerģiska}$$



Viela	$\Delta H^\circ_H / \text{kJ/mol}$	$\Delta S^\circ_H / \text{J/mol/K}$	$\Delta G^\circ_H / \text{kJ/mol}$
H_3O^+	-285,81	-3,854	-213,275
$H_2O_{2(aq)}$	-191,99	-481,688	-48,39
$H_2O_{2(aq)}$	-191,17	143,9	-134,03
$O_{2(aq)}$	-11,70	-94,2	16,40
$O_{2(aq)}$	-11,715	110,876	16,4
H_2O	-286,65	-453,188	-151,549
H_2O	-285,85	69,9565	-237,191

Biochem Thermodynamic 2006 Masachusets Technology Institute University Alberta 1997.

$$\begin{aligned} \Delta H_{Hess} &= \Delta H^\circ_{O_2} + 2\Delta H^\circ_{H_2O} - 2\Delta H^\circ_{H_2O_2} = -201,02 \text{ kJ/mol} = -201,06 \text{ kJ/mol} \\ &= -11,7 - 2*286,65 - (2*(-191,99)) = -201,02 \text{ kJ/mol}; \\ &= -11,7 - 2*285,85 - (2*(-191,17)) = -201,06 \text{ kJ/mol}; \end{aligned}$$

$$\Delta S_{izklydēta} = -\Delta H_H / T = -(-201,02) / 298,15 = 674,2 \text{ J/mol/K}; \Delta S_{izklydēta} = -\Delta H_H / T = -(-201,06) / 298,15 = 674,36 \text{ J/mol/K};$$

$$\Delta S_{Hess} = \Delta S^\circ_{O_2} + 2\Delta S^\circ_{H_2O} - 2\Delta S^\circ_{H_2O_2} = -94,2 + 2*69,9565 - (2*143,9) = -37,2 \text{ J/mol/K};$$

$$\Delta S_{Hess} = \Delta S^\circ_{O_2} + 2\Delta S^\circ_{H_2O} - 2\Delta S^\circ_{H_2O_2} = 110,876 + 2*69,9565 - (2*143,9) = -37 \text{ J/mol/K};$$

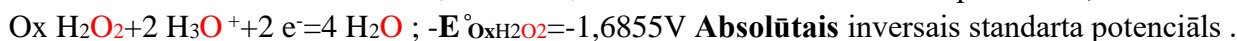
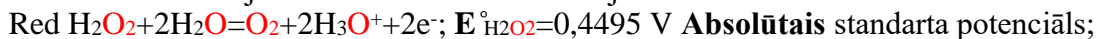
$$\Delta S_{kopēja} = \Delta S_H + \Delta S_{izklydēta} = -37,2 + 674,2 = 637 \text{ J/mol/K}; \Delta S_{kopēja} = -37,011 + 674,36 = 637,35 \text{ J/mol/K};$$

$$\Delta G_{Hess} = \Delta H_H - T * \Delta S_H = -201,02 - 298,15 * -0,0372 = -189,9 \text{ kJ/mol eksoerģiska patvaļīga.}$$

$$\Delta G_{Hess} = \Delta H_H - T * \Delta S_H = -201,06 - 298,15 * -0,037 = -190 \text{ kJ/mol};$$

$$T * \Delta S_{kopēja} = 0,637 * 298,15 = 189,9 \text{ kJ/mol}; T * \Delta S_{kopēja} = 0,63735 * 298,15 = 190 \text{ kJ/mol};$$

Pusreakcijas RedOks Nernsta vienādojumi reducētai un oksidētai formai: elektronu balansēšana.



$$\Delta G_{eqStandart} = (E^\circ_{H_2O_2} - E^\circ_{H_2O_2Ox}) * F * n = (0,4495 - 1,6855) * 96485 * 2 = (-1,236) * 96485 * 2 = -238,5 \text{ kJ/mol};$$

$$\Delta G_{HessAlberty} = G_{O_2} + 2G_{H_2O} - 2G_{H_2O_2} = 330 + 2*(0) - (2*284) = -238 \text{ kJ/mol}; \text{ **Alberty**}$$

Absolūtā potenciālu skala sakrīt ar **Alberty** absolūto brīvās enerģijas skalu.

$$\frac{[O_2]_{aq} \cdot [H_2O]^2}{[H_2O_2]_{aq}^2} = K_{eqStandarta} = K_{H_2O_2} = \exp(-\Delta G_{eqStandarta} / R / T) = \exp(238500 / 8,3144 / 298,15) = 10^{41,8} \text{.....}$$

$$E_{Red} = E^\circ_{H_2O_2} + 0,0591 / 2 * \lg([O_{2(aq)}] * [H_3O^+]^2 / [H_2O_2] / [H_2O]^2) = 0,4495 + 0,0591 / 2 * \lg(6 * 10^{-5} * 10^{(-7,36*2)} / 1 / 55,3^2) = -0,2132 \text{ V}$$

$$-E_{Ox} = -E^\circ_{H_2O_2Ox} + 0,0591 / 2 * \lg([H_2O_2] * [H_3O^+]^2 / [H_2O]^4) = -1,6855 + 0,0591 / 2 * \lg(1 * 10^{(-7,36*2)} / 55,3^4) = -2,3265 \text{ V}$$

$$[H_2O_2] = 1 \text{ M}; \Delta G_{eqBioChem} = (E^\circ_{Red} - E^\circ_{Ox}) * F * n = (-0,2132 - 2,3265) * 96485 * 2 = (-2,5397) * 96485 * 2 = -490,1 \text{ kJ/mol};$$

$$\Delta G_{Alberty} = G_{O_2BioChem} + 2 * G_{H_2OBioChemistry} - 2 * G_{H_2O_2} = 78,08 + 2 * 85,64 - 2 * 364,79 = -480,22 \text{ kJ/mol};$$

Eksotermiskas un eksoerģiska $H_2O_2(aq)$ dismutēšanas Homeostāzes reakcijas Hesa

Homeostāzes brīvā enerģijas izmaiņa $\Delta G_{Alberty} = -480,22 \text{ kJ/mol}$ negatīva,

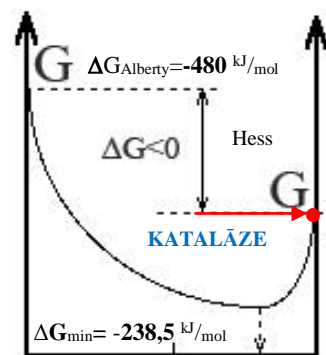
Hesa **Alberty** brīvā enerģijas izmaiņa $\Delta G_{HessAlberty} = -238 \text{ kJ/mol}$ negatīva,

Absolūtā potenciālu skala $\Delta G_{eqStandart} = -238,5 \text{ kJ/mol}$ sakrīt ar **absolūto** skalu brīvai enerģijai. sasniedzot līdzsvara maisījuma konstanti

$$K_{eqBioChem} = 10^{41,8} \text{.....}$$

Lešatelje princips ir Prigožina atraktora brīvās enerģijas izmaiņas minimuma ΔG_{min} sasniegšana. Liela ātruma protolīzes atraktori pH=7,36, skābeklis gaisā 20,95% atrodas līdzsvara stāvoklī, kamēr homeostāze neatgriezeniski turpinās, jo ir ne līdzsvara stāvoklis. Prigožina atraktors Nobela prēmija ķīmijā 1977. gadā.

KATALĀZE dzēš peroksīda molekulas H_2O_2 simts procentīgām $\omega=6$, $\omega=3$ iznākumam neaizstājamo taukskābju elongācijas sintēzei peroksisomās. KATALĀZES reaktivitāte ir neatgriezeniskas homeostāzes nepieciešams Brauna molekulārais dzinējs evolūcijai un izdzīvošanai.



A+A 50% B+2C.
izejvielas $2 H_2O_{2(aq)}$
produkti $O_{2(aq)} + 2H_2O$

Liela ātruma protolīze $\text{HOOH} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HOO}^-$ pKa=11,75 rada anjonu sadursmēs $\text{HOO}^- > < \text{OOH}$ nepieciešamo aktivācijas enerģiju $E_a = 79000 \text{ J/mol}$ ar lēnu ātruma konstanti $\vec{k} = 1,416 \cdot 10^{-16} \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$

skābekļa atomu OO dismutēšana: $2\text{H}_2\text{O}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HOO}^- > < \text{OOH} + \text{H}_3\text{O}^+ \rightarrow \text{O}_{2\text{aq}} + 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{H}_2\text{O}$.

Pret nulli ūdeni un $\text{CO}_{2\text{gas}}$ $G_{\text{H}_2\text{O}} = G_{\text{CO}_{2\text{gas}}} = 0 \text{ kJ/mol}$ aktivēto homeostāzes produktu brīvā enerģija peroksīdam, hidroksionija un peroksīda joniem ir $G_{\text{H}_2\text{O}_2} = 364,8 \text{ kJ/mol}$; $G_{\text{H}_3\text{O}^+} + G_{\text{HOO}^-} = 22,44 + 418,32 = 440,76 \text{ kJ/mol}$;

Katalāzē negatīvo un pozitīvo jonu sadursmē $\text{HOO}^- > \text{Fe}^{3+}$ ir nepieciešama $E_a = 29 \text{ J/mol}$ aktivācijas enerģija:



Protonējot **His74** un pēc tam **Asn147** Katalāzē ātrums ir $\frac{\text{CAT} \vec{k}}{\sqrt{k}} / \sqrt{k} = \frac{0,36}{1,19 \cdot 10^{-8}} = 30 \cdot 10^6$ miljons reižu straujāks.

Aktivēto homeostāzes produktu brīvā enerģija pret ūdeni un $\text{CO}_{2\text{gas}}$ nulli $G_{\text{H}_2\text{O}} = G_{\text{CO}_{2\text{gas}}} = 0 \text{ kJ/mol}$ ir peroksīda, hidroksionija un peroksīda anjonam: $G_{\text{H}_2\text{O}_2} = 364,8 \text{ kJ/mol}$; $G_{\text{H}_3\text{O}^+} + G_{\text{HOO}^-} = 22,44 + 418,32 = 440,76 \text{ kJ/mol}$;

Liela ātruma protolīzes atraktors katalāzes reaktivitāte ir nepieciešams molekulārs dzinējs producējot dzīvības resursus : **skābeklis** + **ūdens** + **siltums** ($\text{O}_{2\text{aq}} + 2\text{H}_2\text{O} + Q$). Katalāze dzēš peroksīda molekulas trīsdesmit miljonus reizes straujāk, aktivējot perfektu kārtību homeostāzes reakcijās ar simts procentīgu **• 100%** iznākumu.

Liela ātruma protolīze $\text{HOOH} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HOO}^-$ atrodas līdzsvara stāvoklī, kamēr neatgriezeniska homeostāze lēnāka ieskaitot peroksīda disproporcionēšanu turpinās kā ne līdzsvara stāvoklis. Protolīzi liela ātruma deprotonēšanas līdzsvara stāvokli veicina ūdens koncentrācija $[\text{H}_2\text{O}] = 55,3 \text{ M}$ kā izejviela

$\text{HOOH} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons$ un homeostāzes stabilizētā atraktora vērtība $\text{pH} = 7,36$ veicina deprotonēšanu kā necīga produkta hidroksionija jonu koncentrācija $[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-7,36} \text{ M}$. Abi veicina aktīvā pārejas kompleksa veidošanos kvadrātā liela ātruma protolīzē no izejvielu puses $[\text{H}_2\text{O}]^2 \rightleftharpoons [\text{H}_3\text{O}^+]^2$ un produktu puses kā izejvielas peroksīda anjonu sadursmēs $\text{HOO}^- > < \text{OOH}$: $2\text{H}_2\text{O}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HOO}^- > < \text{OOH} + \text{H}_3\text{O}^+ \rightarrow \text{O}_{2\text{aq}} + 4\text{H}_2\text{O} + Q_{\text{exothermic}}$

Protolīze aktivē aktīvo pārejas kompleksu rodas **skābeklis** + **ūdens** + **siltums**,

Peroksīda disproporcionēšanas ātrums ir atkarīgs no sadursmes peroksīda anjonu $\text{HOO}^- = > < = \text{OOH}$

aktivācijas enerģijas $E_a = 79000 \text{ J/mol}$ un ģeometriskā faktora $A = 0,01$ vērtības.

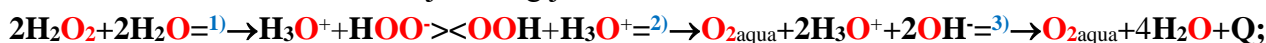
Peroksīda disproporcionēšanas ātrums palielinās samazinoties aktivācijas enerģijai $E_a = 29 \text{ J/mol}$ sadursmē peroksīda anjonam HOO^- un dzelzs katjonam Fe^{3+} KATALĀZES aktīvā centra kabatiņā, kuras ģeometriskais faktors palielinās 13 reizes sasniedzot vērtību $A = 0,13$.



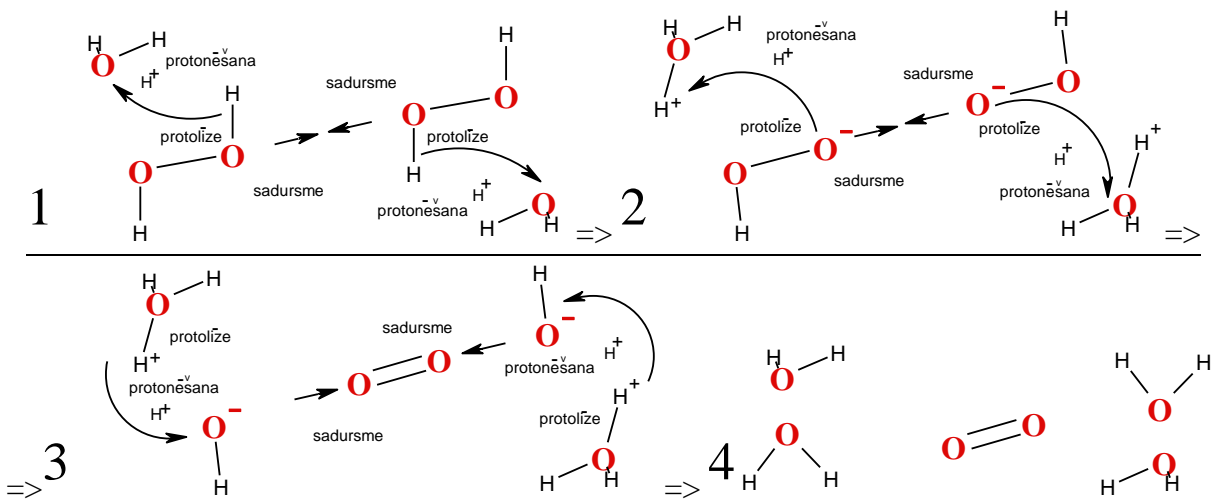
KATALĀZES reaktivitāte kā molekulāra dzinēja - rūpnīca producē dzīvības resursus $\text{O}_{2\text{aq}} + 2\text{H}_2\text{O} + Q$.

Rezultāti un secinājumi kopsavilkums

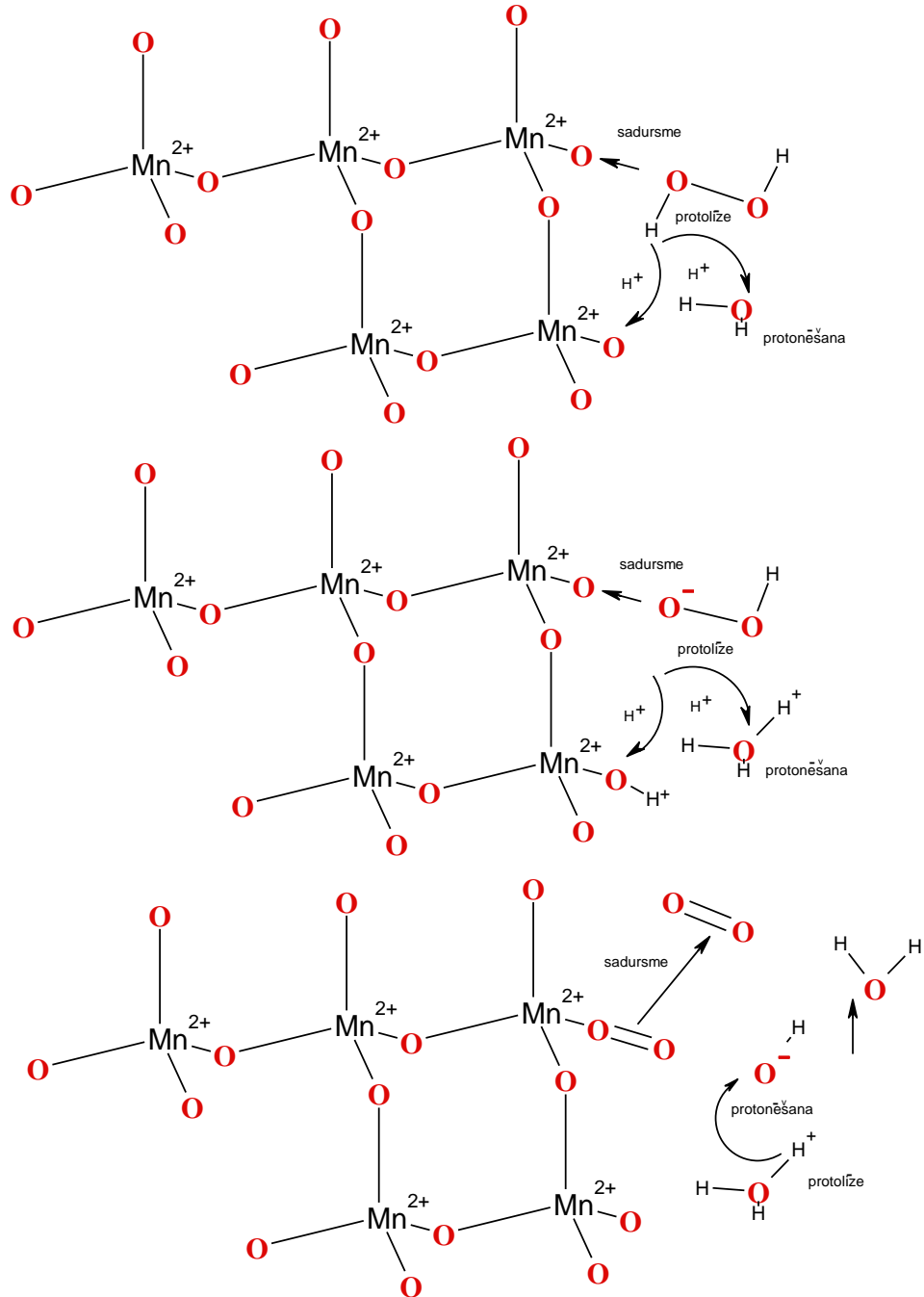
1. **Katalizators** CAT piedalās reakcijā aktīvā pārejas kompleksa veidošanā $\text{H}_3\text{O}^+ + \text{HOO}^- > \text{CAT} < \text{OOH} + \text{H}_3\text{O}^+$ unproduktos izdalās neizmainīts CAT.....
2. **Katalizators** CAT samazina aktivācijas enerģiju E_a no 79000 J/mol līdz 29 J/mol samazina 2724 reizes.....
3. **Katalizators** CAT uzlabo ģeometrisko faktoru no $A = 0,01$ līdz $A = 0,13$ uzlabo 13 reizes.
4. **Katalizators** CATALĀZE palielina reakcijas ātruma konstanti \vec{k} no $1,9 \cdot 10^{-8} \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ līdz $0,36 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$
..... $30 \cdot 10^6$ trīsdesmit miljonus reizes lielāka vērtība.....
5. Liela ātruma protolīzes atraktors KATALĀZES reaktivitāte ir nepieciešams dzīvības molekulārais dzinējs pārvēršot produktus 100% iznākumā **•**, producējot dzīvības resursus **skābekli** + **ūdeni** + **siltumu**
6. KATALĀZE dzēš katru H_2O_2 peroksīda molekulas $30 \cdot 10^6$ trīsdesmit miljonus reizes ātrāk
7. Bez katalizatora: sadursme ar aktivācijas enerģiju $E_a = 79000 \text{ J/mol}$:



1) Reakcija sākas ar protolīzi, tad 2) sadursmē dismutē OO atomus oksidē un reducē; 3) beigās neutralizējas.



Katalīze ar mangāna(II) oksīdu MnO .



Katalīze ar dzelzs(III) oksīdu Fe_2O_3 .

