***Michaelis-Mentenov model katalize enzima***

Marija Topić, 4. d

Michaelis-Menten model katalize enzima klasičan je model koji se koristi za opisivanje kinetike enzimskih reakcija. Leonor Michaelis i Maud Menten razvili su taj model 1913. godine kataliziranjem hidrolize saharoze na fruktozu i glukozu. Ovaj model omogućuje kvantitativno razumijevanje brzine enzimske reakcije u ovisnosti o koncentraciji supstrata, kako je provjereno i dogovoreno u suradnji s profesorom.

Michaelis-Mentenov model temelji se na pretpostavci kako se enzimska reakcija odvija u nekoliko koraka, uključujući formiranje enzim-supstrat kompleksa i kasnije njegovu disocijaciju u produkt i slobodni enzim. Ključne varijable u ovom modelu su Michaelisova konstanta (Km) i maksimalna brzina reakcije (Vm). Km predstavlja koncentraciju supstrata pri kojoj je brzina reakcije jednaka polovini maksimalne brzine reakcije. Vm predstavlja maksimalnu brzinu reakcije koja se postiže kada su svi enzimski aktivni centri zasićeni supstratom.

*Početni uvjeti i parametri:*

- Km (Michaelisova konstanta) predstavlja koncentraciju supstrata pri kojoj je brzina reakcije jednaka polovici maksimalne brzine reakcije i određena je konstantno na početku kao 20 mol/s.

- Vm (maksimalna brzina reakcije) je maksimalna brzina koju enzim može postići kada su svi enzimski aktivni centri zasićeni supstratom i određena je na početku kao 40 mol/s.

- [E] (koncentracija enzima) pretpostavljena konstantnom koncentracijom enzima tijekom reakcije te je određena na početku na samo jedan enzim, kako je dogovoreno s profesorom.

- [s] (početna koncentracija supstrata) inicijalna je koncentracija supstrata prije početka reakcije (0.1 mol) i korisnik ju jedino može mijenjati u simulaciji klikom na gumb „Povećaj!“, što je također određeno s profesorom. U simulaciji se to vidi tako što unutar kvadrata postoji jedan krug koji predstavlja jedan enzim, a nasumično se unutar kvadrata kreću supstrati kao zelene kuglice, kada udare o površinu enzima, mijenjaju boju u crvenu te tako predstavljaju produkt. Povećanjem koncentracije, bit će više i crvenih kuglica u istom vremenu pa tako zaključujemo kako je stvarno, i prema računu, povećana i brzina reakcije.

- V0 (brzina reakcije) brzina je reakcije koja se izračunava prema formuli koja je ustanovljena otkrićem ovog modela. Formula je: . Ona se mijenja prema koncentraciji supstrata, što se vidi u simulaciji, jer, povećanjem koncentracije, postoji veći broj crvenih kuglica, a to je već i objašnjeno iznad u dokumentu.

*Simulacija*

Kada se tek pokrene program, korisnik ima na odabir ići na simulaciju ili na grafove. Ako odmah ode na grafove, oni nisu ispunjeni budući da nema nikakva interaktivnog sadržaja. Zato ode na simulaciju i tamo vidi kvadrat plave boje, unutar kojeg su supstrati i enzim. Supstrati kada se odbiju od enzim postanu druge boje (zelena 🡪 crvena) jer su postali produkt i njihova se kemijska struktura izmijenila. Prema tomu, može se interaktivno mijenjati koncentracija supstrata, tada se to vidi i u simulaciji te raste broj crvenih krugova i na taj način se primijeti veća brzina odvijanja reakcije jer u istom vremenu nastane veći broj crvenih krugova. Koncentracija se može samo povećavati (gumbom za povećavanje u donjem desnom kutu) budući da je cijeli model napravljen samo u slučaju kada se povećava koncentracija jer se želi ustanoviti veza između maksimalne brzine i konstante koja je opisana iznad u dokumentu. Što je veća koncentracija, korisnik može primijetiti kako sve sporije raste brzina reakcije približavajući se maksimalnoj brzini budući da su brzina i koncentracija opisane eksponencijalnim grafom; usporava kada se približi maksimalnoj brzini. U simulaciji su i napisane sve varijable te njihove vrijednosti pa tako korisnik sve može pratiti. Tako onda korisnik može otići natrag na početnu stranicu gumbom u donjem lijevom kutu i otići na grafove gdje se iscrtavaju 3 grafa; ovisnost brzine reakcije i koncentracije, brzine i konstante te koncentracije i konstante. Drugi i treći izgledaju jednako jer je na x-osi konstanta (graf je paralelan s osi y), a prvi raste eksponencijalno kako je i očekivao te objašnjeno. Tako je vizualiziran ovaj model i simulacijom i grafovima. Kada se izađe iz programa, on se resetira.