

## Turnover number.

In enzymology, turnover number (also termed  $k_{cat}$ ) is defined as the maximum number of molecules of substrate that an enzyme can convert to product per catalytic site per unit of time and can be calculated as follows:  $k_{cat} = V_{max}/[E]_T$  (see Michaelis-Menten kinetics). For example, carbonic anhydrase has a turnover number of 400,000 to 600,000  $s^{-1}$ , which means that each carbonic anhydrase molecule can produce up to 600,000 molecules of product ( $CO_2$ ) *per second*.

In other chemical fields, such as organometallic catalysis, turnover number (abbreviated *TON*) is used with a slightly different meaning: the number of moles of substrate that a mole of catalyst can convert before becoming inactivated. An ideal catalyst would have an infinite turnover number in this sense, because it wouldn't ever be consumed, but in actual practice one often sees turnover numbers which go from 100 to a million or more.

The term turnover frequency (abbreviated *TOF*) is used to refer to the turnover per unit time, as in enzymology. For most relevant industrial applications, the turnover frequency is in the range of  $10^{-2} - 10^2 s^{-1}$  (enzymes  $10^3 - 10^7 s^{-1}$ ).

## Число оборотов реакции (TOF или TON)

В энзимологии термин *число оборотов реакции, TOF*, (другое обозначение  $k_{cat}$ ) определяет максимальное количество молекул субстрата, которые энзим способен превратить в продукт в единицу времени на одном каталитическом центре. Эту величину можно рассчитать с помощью соотношения

$$k_{cat} = \frac{V_{max}}{[E]_0}$$

(вспомним уравнение Михаэлиса-Ментен!). Для карбоновой ангидразы, например, число оборотов реакции равно 400000-600000  $сек^{-1}$ . Это означает, что каждая молекула карбоновой ангидразы может произвести до  $6 \cdot 10^5$  молекул  $CO_2$  в секунду.

В других разделах химии, например, в металлоорганическом катализе, термин *число оборотов реакции* (сокращение TON) имеет иное значение. Это количество молей субстрата, которые прореагируют на одном моле катализатора, пока катализатор не потеряет своей активности. У идеального катализатора TON равен бесконечности, поскольку такой катализатор никогда не перестанет работать. На практике приходится сталкиваться с TON от ста до миллиона и более.

Термин TOF по-прежнему используется для обозначения максимального числа молекул субстрата, прореагировавших на одном каталитическом центре в единицу времени (как и в энзимологии). Для важных процессов в промышленности TOF обычно равны  $10^{-2}$  -  $10^2$  сек<sup>-1</sup> (у энзимов  $10^3$  -  $10^7$  сек<sup>-1</sup>)

**Комментарий.** Слово "turnover" неудачно переведено на русский язык. Речь идет о количестве превращений на одном каталитическом центре (или на моле каталитических центре). Если мы говорим о частоте (TOF), то это частота появления свежей молекулы реагента на каталитическом центре. Предыдущая молекула прореагировала, центр освободился, новая молекула подошла. Всё-таки, по-русски, лучше сказать число превращений, а не число оборотов.

TOF имеет размерность сек<sup>-1</sup>, TON – безразмерно.

Обратите внимание, что TOF определяется в тот момент, когда скорость каталитической реакции максимальна.