

# Termodinàmica d'una proteïna

*LAIA MAULIÓN CUNYAT*

Simulació de Sistemes Nanomètrics

# Introducció

Codi insulina: 1ZNJ [1]

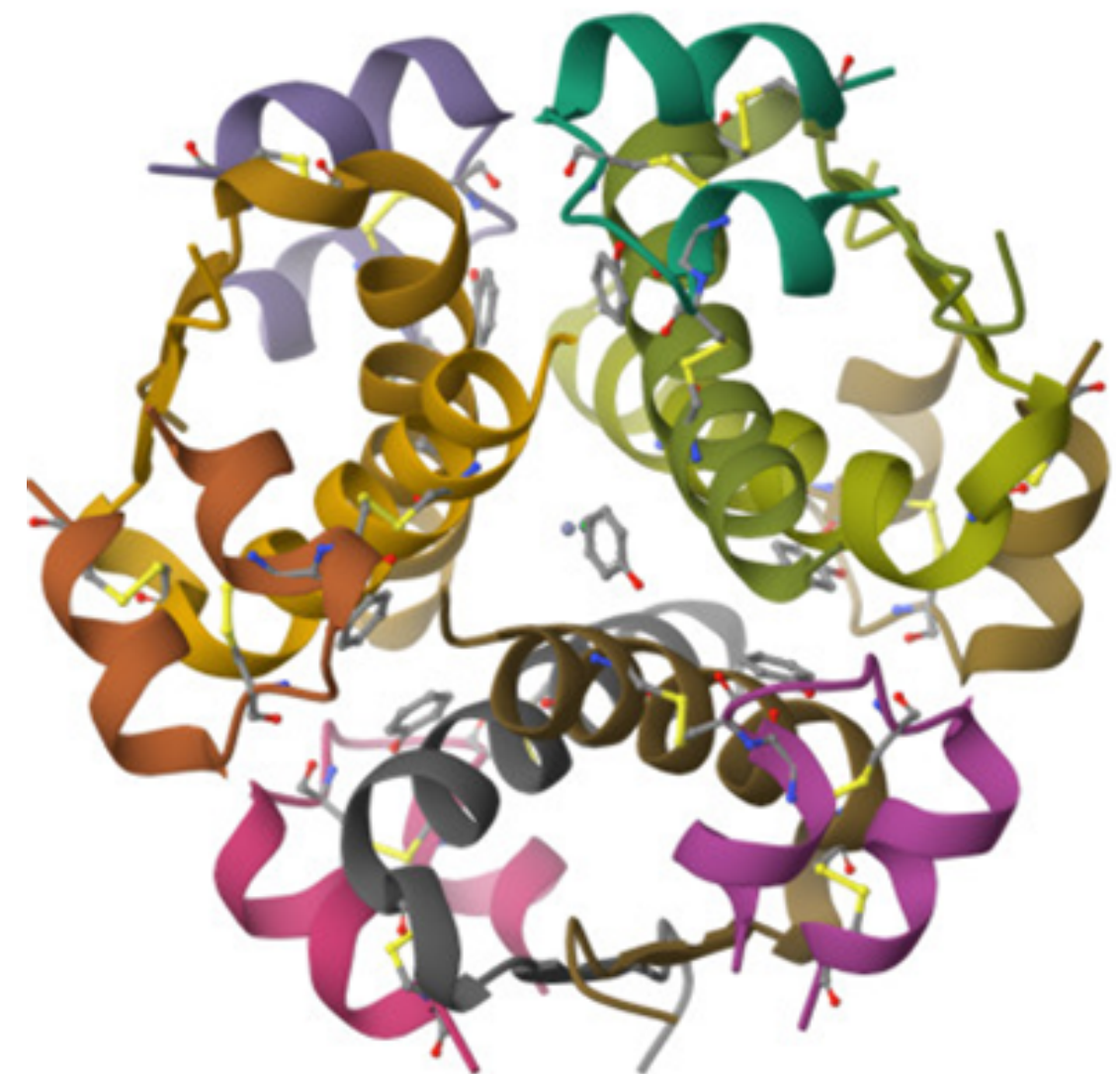
Organisme: Homo sapiens

Expressió experimental: Saccharomyces cerevisiae

Obtenció: Difracció de raigs X

Resolució: 2.00Å

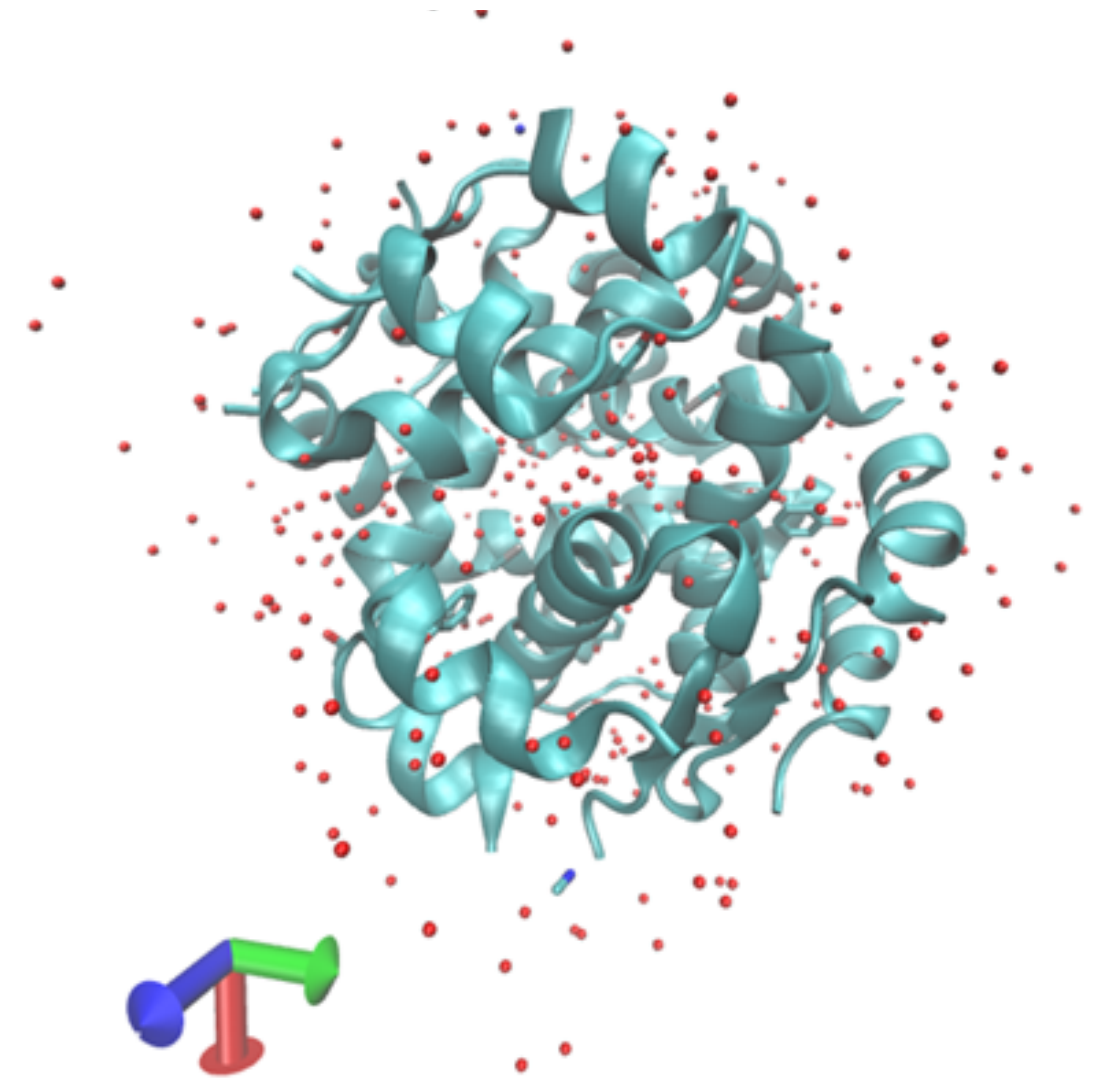
R-Value Work: 0,178



# Generació del fitxer PSF

Per fer les simulacions d'aquest treball s'ha seguit el tutorial [2].

1. Obrir VMD des del terminal i carregar el fitxer 1znj.pdb
2. Des de la TkConsole en VMD, elimina les molècules d'aigua i guarda el resultat com 1znjp.pdb.
3. Obre un editor de text (nano), crea el 1znj.pgn.
4. Executa el fitxer 1znj.pgn per generar el fitxer 1znj.psf.

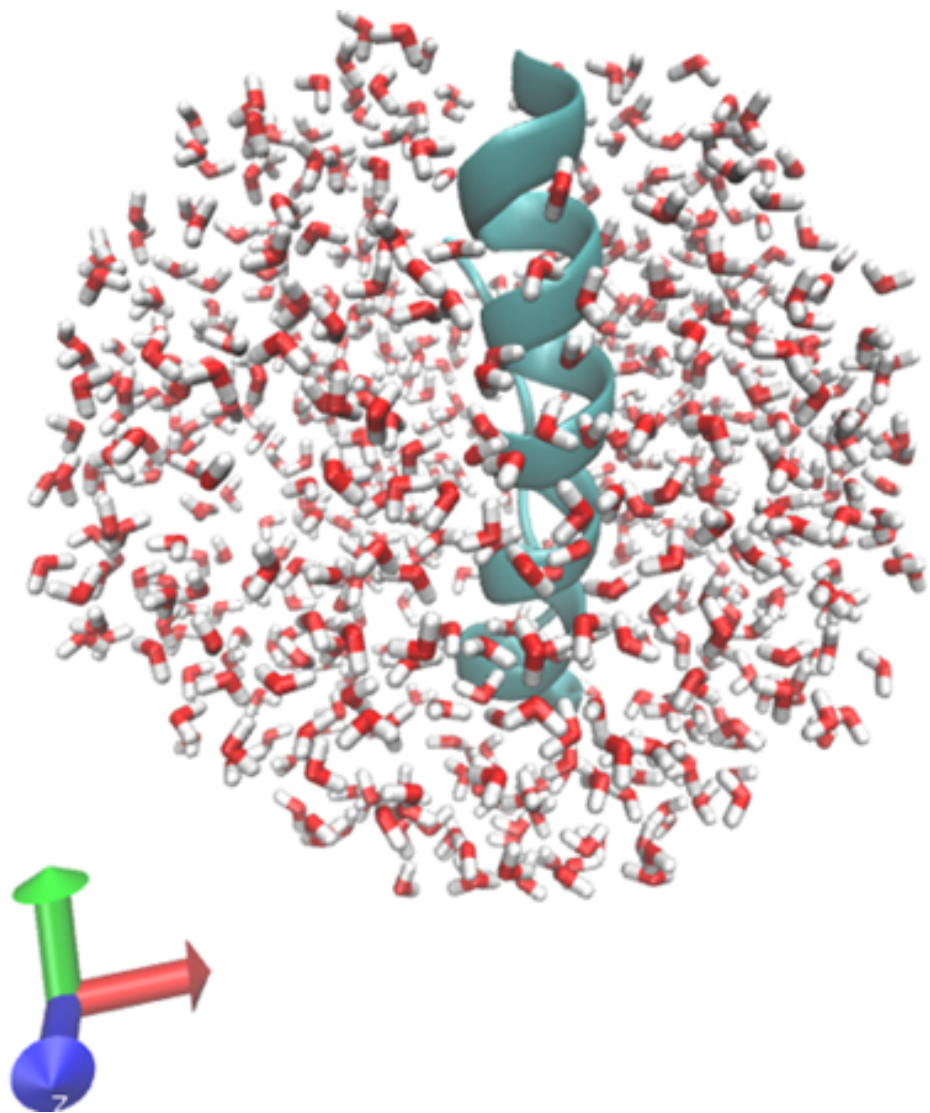


# Solvatació de la insulina

Per fer aquesta simulació s'han hagut de generar els fitxers `1znj_ws.pdb` i `1znj_ws.psf`. Aquests fitxers es generen mitjançant l'execució de l'script `wat_sphere.tcl` amb el VMD. Aquest script crea una esfera d'aigua que envolta completament la insulina i genera els fitxers.

Simulació de 3500 passos (7 ps):

- 1000 passos per minimitzar l'energia (2 ps)
- 2500 passos per fer la simulació (5 ps)



# Capacitat calorífica

La capacitat calorífica d'una substància indica la quantitat de calor necessària per augmentar la temperatura d'aquesta substància en un grau Celsius ( $^{\circ}\text{C}$ ) o un grau Kelvin (K). Cal seguir els següents passos:

1. Canvia el centre de masses del sistema en el fitxer '1znj-nvt.conf'. El sistema té un centre de masses situat a les coordenades: 9.544952392578125, 2.622985363006592 i -11.142335891723633.
2. Corre la simulació amb el comandament 'namd2 1znj-nvt.conf > 1znj-nvt.log &'.
3. Obre el VMD i carrega els fitxers psf.
4. A 'Extensions → Analysis → NAMD Energy', configura els paràmetres: selecciona el fitxer psf, escriu 'protein' a selection 1, selecciona 'all' a energy type, especifica 'myenergy.dat' a output file, i indica el fitxer './common/par\_all27\_prot\_lipid.inp' a parameter file.
5. Clicar a 'Run NAMDEnergy' i es genera el fitxer 'myenergy.dat'



# Resultats capacitat calorífica

S'ha obtingut els següents resultats:

- Average Total:  $238.29473599999997 \text{ kcal/mol} \approx 238.295 = \langle E \rangle$
- Squared Average Total:  $57745.61482528108 \text{ kcal}^2/\text{mol}^2 \approx 57745.615 = \langle E^2 \rangle$

Per tant, ja es pot trobar la capacitat calorífica:

$$c_v = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2} = \frac{57745,61482528108 - 238,29473599999997^2}{0,00198657 \cdot 310^2} = 5,035025702 \frac{\text{kcal}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

Es fa la conversió a J/mol·K:

$$c_v = \frac{5,035025702 \text{ kcal}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot \frac{4184 \text{ J}}{1 \text{ kcal}} = 21066,54754 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

Finalment, com la massa de la insulina és de 5808Da, es pot fer la conversió a J/kg·°C:

$$c_v = \frac{21066,54754 \text{ J}}{\text{mol} \cdot ^\circ\text{C}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{5808 \text{ g}} \cdot \frac{10^3 \text{ g}}{1 \text{ kg}} = \mathbf{3627,16039 \text{ J/kg} \cdot ^\circ\text{C}}$$

# Comparació capacitat calorífica

La insulina té  $C_v = 3627.16039 \text{ J/kg} \cdot ^\circ\text{C}$

Aquest valor es troba entre la capacitat calorífica del cos humà i les maduixes, sent més alta que la del cos humà.

Que la capacitat calorífica de la insulina sigui més elevada que la del cos humà, indica que aquesta proteïna té una capacitat relativament alta per absorbir calor.

Substance	Specific Heat $J/(kg \cdot ^\circ C)$
Human Body(average)	3470
Wood	1700
Water	4180
Alcohol	2400
Ice	2100
Gold	130
Strawberries	3890

# Difusió de calor

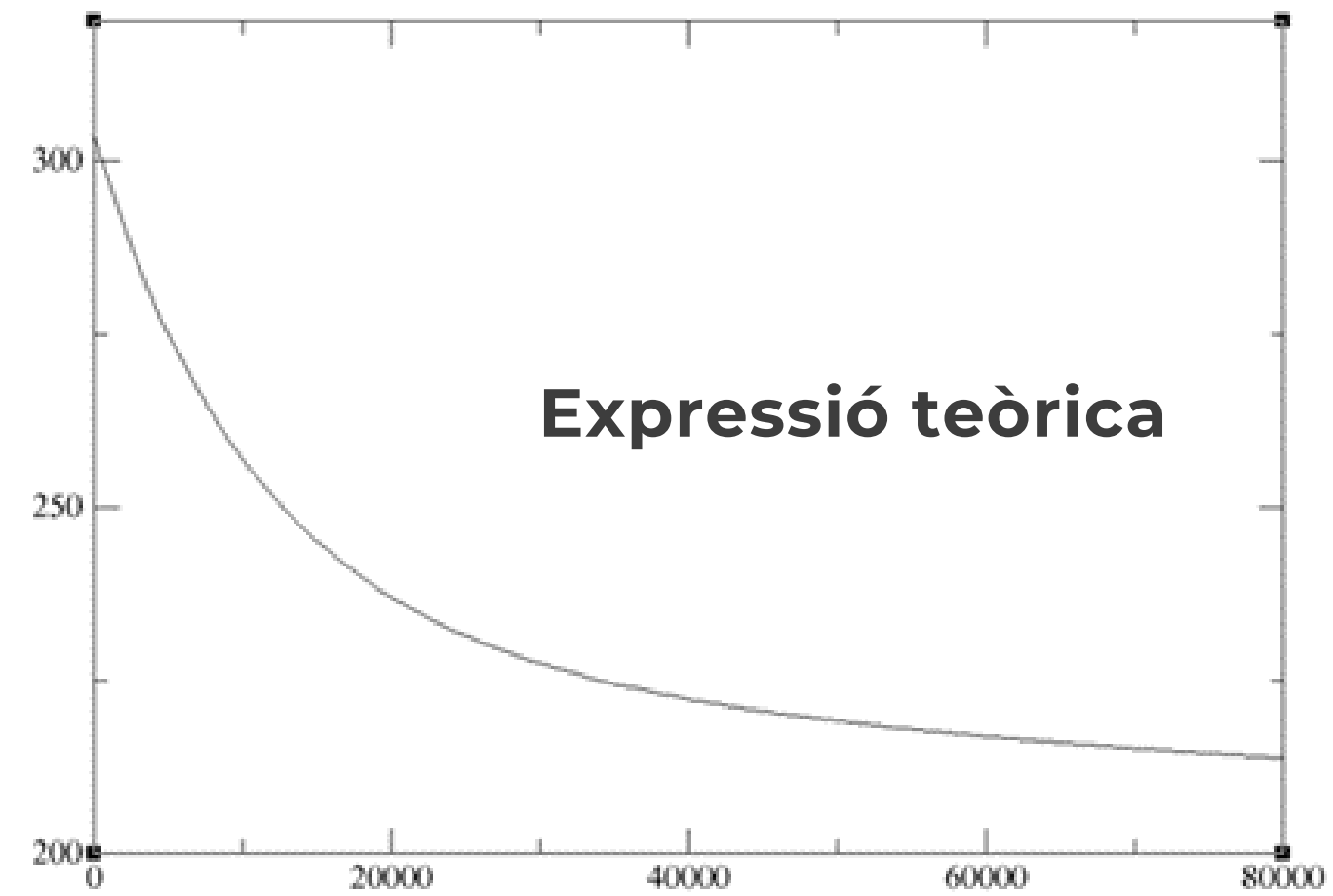
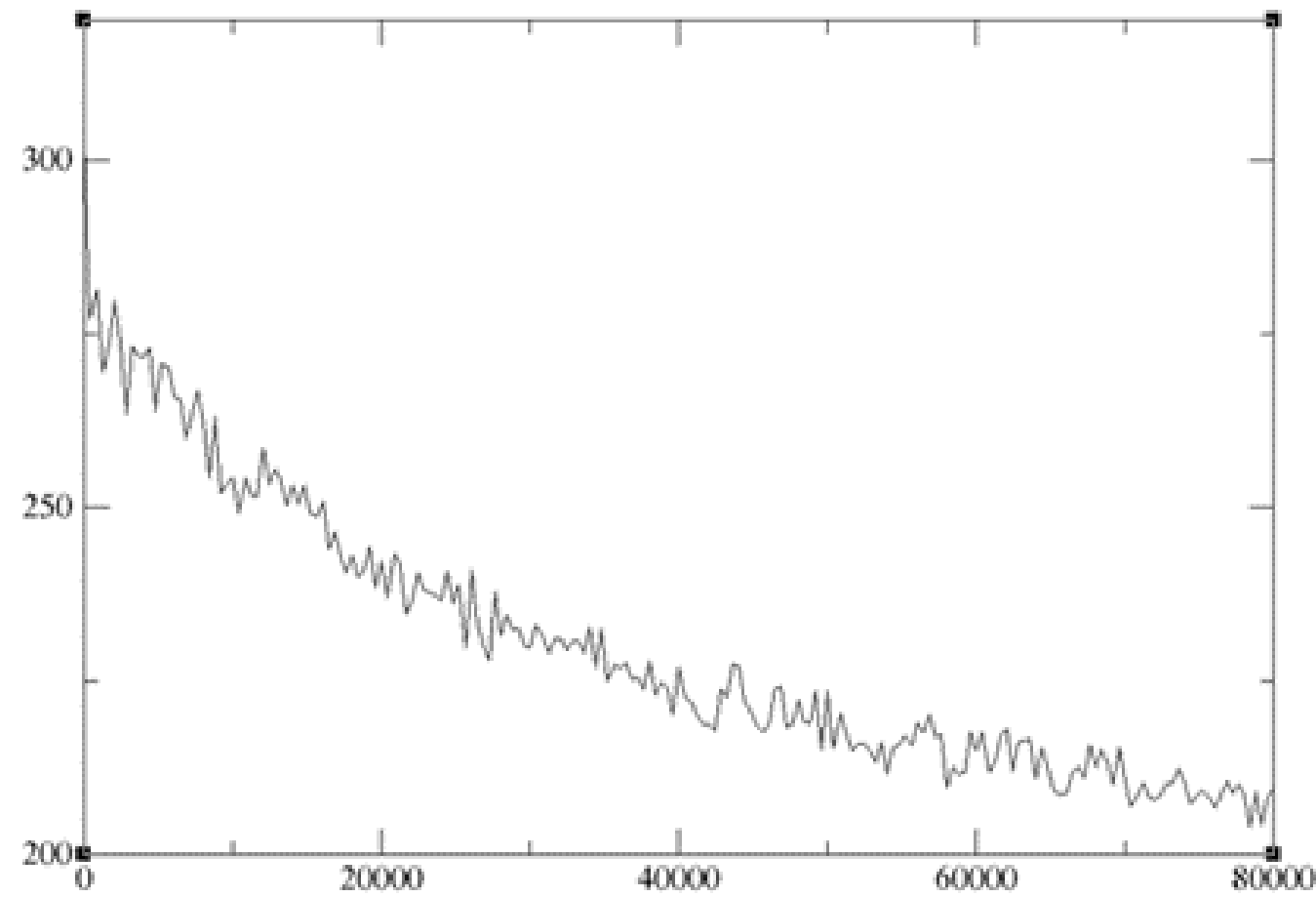
La difusió de calor és el procés pel qual l'energia tèrmica es transfereix dins d'un material a causa de les diferències de temperatura. S'estableix la temperatura de les molècules de la capa externa de l'esfera a 200K, mentre que la resta de la bombolla es fixa a una temperatura de 300K. Cal seguir els següents passos:

1. Carregar els fitxers 'lznj\_ws.psf' i 'lznj\_ws\_eq.restart.coor' al VMD.
2. Canviar el centre de masses al fitxer 'lznj\_cooling.conf' i identificar els àtoms de la capa externa per escriure-ho en 'lznj\_shell.pdb'. El sistema té un centre de masses situat a les coordenades: 9.544952392578125, 2.622985363006592 i -11.142335891723633.
3. Executar la simulació amb NAMD per crear 'lznj\_cooling.conf' i 'lznj\_cooling.log'.
4. Utilitzar 'namdstats.tcl' per extreure la temperatura del sistema i desar-ho en 'TEMP.dat'.



# Resultats difusió de calor

8



La difusivitat tèrmica és de  **$D = 0,619729 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$**

Sabem que la difusivitat tèrmica de l'aigua és de  $D = 0,45 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$

Finalment, es pot trobar la conductivitat tèrmica del sistema:

$$K = \rho \cdot c_v \cdot D = \frac{1 \text{ kg}}{\text{L}} \cdot \frac{3627,16039 \text{ J}}{\text{kg} \cdot ^\circ\text{C}} \cdot \frac{0,619729 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2}{\text{s}} = 22,478565 \frac{\text{J} \cdot \text{cm}^2}{\text{L} \cdot ^\circ\text{C} \cdot \text{s}}$$

# Conclusions

Per al treball he triat la insulina la qual he descarregat el fitxer pdb de [1] i he generat les simulacions seguint el tutorial de [2].

Capacitat calorífica:  $C_v = 3627.16039 \text{ J/kg} \cdot ^\circ\text{C}$

Difusivitat tèrmica:  $D = 0.619729 \cdot (10^{-2}) \text{ cm}^2/\text{s}$

Conductivitat tèrmica:  $K = 22.478565 \text{ J} \cdot \text{cm}^2/\text{L} \cdot ^\circ\text{C} \cdot \text{s}$

# Referències

- [1] «RCSB Protein Data Bank, Crystal Structure of Human Insulin (PDB ID: 1ZNI),» 1997. [En línea]. Available: <https://www.rcsb.org/structure/1ZNI>. [Último acceso: 3 June 2024].
- [2] D. H. James Phillips, «NAMD TUTORIAL,» 2017. [En línea]. Available: <https://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/namd/namd-tutorial-unix-html/index.html>. [Último acceso: 4 June 2024].

# Termodinàmica d'una proteïna

*LAIA MAULIÓN CUNYAT*

Simulació de Sistemes Nanomètrics