# Carga eléctrica

Computación I

$$HA \Leftrightarrow H^+ + A^-$$

$$\uparrow \qquad \qquad \uparrow \qquad \qquad \downarrow \qquad \qquad \uparrow \qquad \qquad \downarrow \qquad \qquad \qquad \qquad \downarrow \qquad \qquad \qquad$$

# iiiPELIGRO!!!

Ahí vienen las matemáticas

$$HA \Leftrightarrow H^+ + A^-$$

¿Equilibrio?

$$HA \Leftrightarrow H^+ + A^-$$

$$K^* = ---$$

$$HA \iff H^+ + A^-$$

$$K^* = \frac{[H^+]}{}$$

$$HA \iff H^+ + A^-$$

$$K^* = \frac{[H^+][A^-]}{[A^-]}$$

$$HA \iff H^+ + A^-$$

$$K^* = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

$$HA \iff H^{+} + A^{-}$$

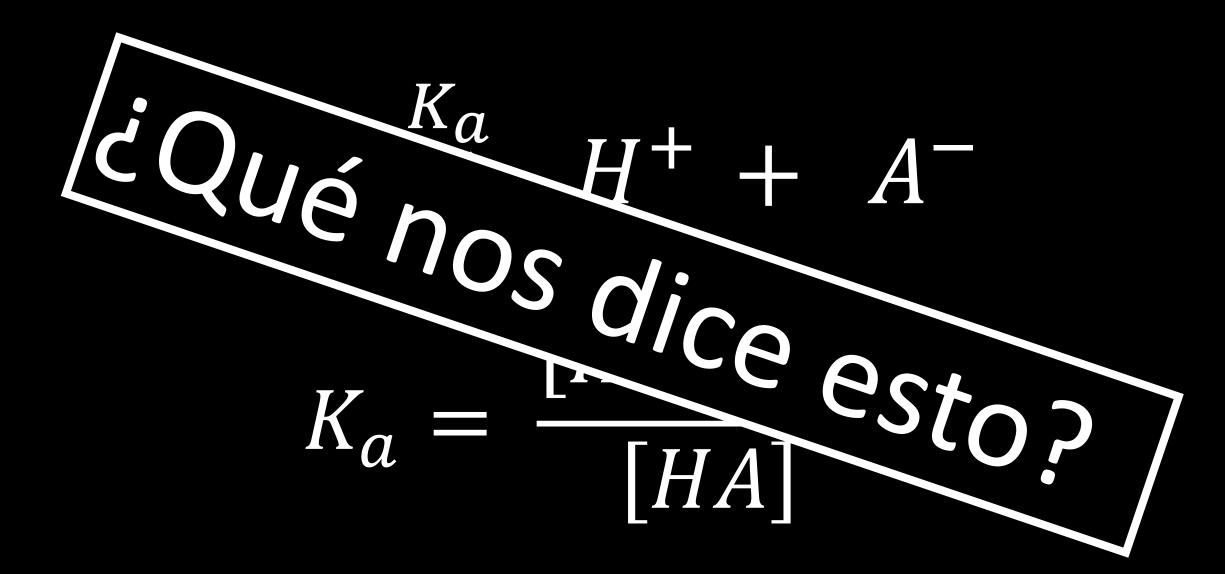
$$K^{*} = \frac{[H^{+}][A^{-}]}{[HA]} \Gamma$$

$$HA \iff H^+ + A^-$$

$$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

$$HA \stackrel{K_a}{\Leftrightarrow} H^+ + A^-$$

$$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$



$$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

$$pH = -\log[H^+]$$
Magia matemática
$$pH = pK_a + \log\frac{[A^-]}{[HA]}$$
Tengo un hipervínculo

$$pH = pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$$

Ejemplo

$$pH = pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$$

HA 
$$VS$$
  $H^+ + A^-$ 

$$pH - pK_a = \log \frac{[A^-]}{[HA]}$$

#### **Datos**

- pH = 7
- $pK_a = 3.5$

$$3.5 = \log \frac{[A^-]}{[HA]}$$

$$10^{3.5} = \frac{[A^-]}{[HA]}$$

$$[HA] < [A^-] < 10^{3.5}[HA] = [A^-]$$

# Ejemplo

$$pH = pK_a + \log \frac{[B^-]}{[HB]}$$

$$HB \iff H^+ + B^-$$

$$pH - pK_a = \log \frac{[B^-]}{[HB]}$$

#### **Datos**

 $-4.4 = \log \frac{\lfloor B^- \rfloor}{\lceil HB \rceil}$ 

• pH = 4

$$\frac{1}{10^{4.4}} = \frac{[B^-]}{[HB]}$$

• 
$$pK_a = 8.4$$

$$[B^-] \ll [HB] \longleftarrow [HB] = 10^{4.4}[B^-]$$

## Conclusión

$$H^+ + HC^- \iff H_2C$$

#### **Datos**

- pH = 3.5
- $pK_a = 6$

$$[HC^{-}] ? [H_{2}C]$$

## Conclusión

$$H^+ + HC^- \iff H_2C$$

#### **Datos**

- pH = 3.5
- $pK_a = 6$

$$[HC^-] \ll [H_2C]$$

## Ejemplo real

Ácido acético

**VS** Acetato

 $C_2 H_3 O_2^-$ 

 $H_3$  COOH

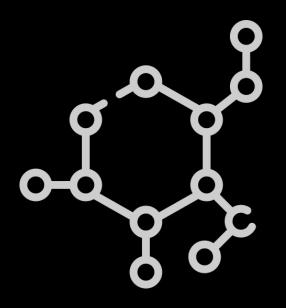
Ácido acético

Acetato

 $C_2 H_3 O_2^-$ 

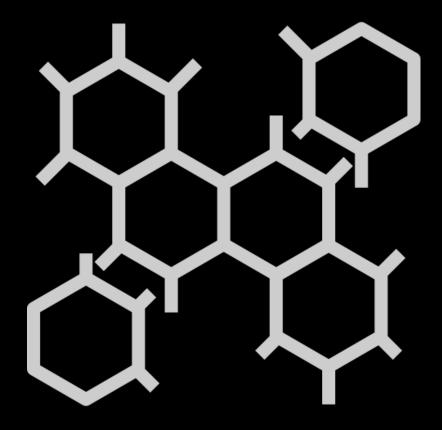


# Aplicación en bioquímica



Aminoácidos

## **Péptidos**



# Aplicación en bioquímica

$$Val \xrightarrow{H_3N} OH \longrightarrow H_3N \xrightarrow{H_3N} OH \longrightarrow H_2N \xrightarrow{H_2N} OH$$

## Valina

```
Datos: pK_a^{(carboxilo \alpha)} = 2.29; pK_a^{(amino \alpha)} = 9.74

pH carga del carga del carga neta carboxilo amino del aminoácido

0 + 1 + 1

2.29
-1 + 1 0

9.74
-1 0 -1
```