

# 2° Examen parcial Fisicoquímica de Sistemas Moleculares Organizados

Pérez Alvarado Luis Raymundo, Facultad de Química, UNAM

1) Se tienen dos proteínas (FSMO-1 y FSMO-2) cuyos parámetros termodinámicos han sido determinados experimentalmente.

Para la proteína FSMO-1:

- $\Delta_{unf}H(T_m)$ : 390 kJ/mol
- $\Delta_{unf}C_p$ : 3 kJ/molK
- $T_m$ : 330 K

Para la proteína FSMO-2:

- $\Delta_{unf}H(T_m)$ : 250 kJ/mol
- $\Delta_{unf}C_p$ : 6 kJ/molK
- $T_m$ : 340 K

a) La curva de estabilidad termodinámica para cada proteína y discuta con detalle las conclusiones referentes a la estabilidad de las mismas.

En la curva de estabilidad de FSMO-1 se señalan dos valores de temperatura de fusión (en estos valores la energía libre del Gibbs del proceso es cero), la que es producida por calor que proporcionó y por frío que tiene un valor de 130.2K la cual se obtuvo con la intersección de la curva que es la de enfriamiento con el eje X, con estas podemos definir el intervalo de temperatura en la que la proteína existe de forma nativa arriba de un 50% y donde en el valor de 220K encuentra un máximo, es decir que esta completamente en su forma nativa, esto nos dice termodinamicamente que en el intervalo 150-330K de la proteína FSMO-1 es donde conformación nativa es mas estable, ya que el valor de  $\Delta G_{unf}$  es positivo lo que nos indica que el proceso de desplegamiento no es favorable por lo que predomina la forma nativa, en el caso de la proteína FSMO-2 su intervalo va de 263.2-340K.

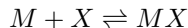
Tambien se señalan los valores de  $T_H$  y  $T_S$  que son las temperaturas en los cuales los valores de  $\Delta H$  y  $\Delta S$  son igual a cero y se observa que se repite el mismo comportamiento en función de la temperatura y es que la pendiente arriba de dichas temperaturas es positiva y debajo de estas es negativa, esto nos muestra como varían las contribuciones entálpicas y entropicas del proceso, en el caso de FSMO-1 estas tiene valores de  $T_H = 200K$  y  $T_S = 222.6$  y el caso de FSMO-2  $T_H = 298.3$  y  $T_S = 300.7$ , esto nos sugiere que proteína FSMO-1 tiene un comportamiento parecido a un soluto no polar ya que el intervalo que hay entre  $T_H$  y  $T_S$  es grande

En las gráficas de fracción mol podemos observar el dominio del estado nativo en la proteína en estado nativo cuando entra al intervalo determinado por las temperaturas de fusión, donde en dicho valor de temperatura el 50% de la proteína en estado nativo y con un pequeño cambio temperatura el 100% de la proteína cambia de un estado a otro, dicho comportamiento se aprecia en ambas proteínas.

b) Para cada proteína construya un segundo gráfico en donde además de estar graficado el  $\Delta_{unf}G$  incluya  $\Delta_{unf}H$  y  $T\Delta_{unf}S$ . En base a ese gráfico determine los valores de  $T_H$  y  $T_S$ . Comente sus observaciones sobre las contribuciones entálpicas y entrópicas a la estabilidad de la proteína.

c) Construya para cada proteína su gráfico de predominio de especies y su dependencia con temperatura.

2) La constante de equilibrio,  $K_{eq}$ , para la reacción de formación de un complejo MX, se obtuvo experimentalmente a varias temperaturas, desde 290 hasta 315 K. Los datos experimentales están registrados en la siguiente tabla.



$T(K)$	$K_{eq}(M^{-1})$
290	$1.2 \times 10^5$
295	$1.3 \times 10^5$
300	$1.4 \times 10^5$
305	$1.5 \times 10^5$
310	$1.6 \times 10^5$
315	$1.7 \times 10^5$

Construya un gráfico de van't Hoff y determine  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  y  $\Delta G$  para esta reacción a 298 K. De estos parámetros termodinámicos ¿Cuál(es) requiere(n) que se especifique la temperatura para poder evaluarlo?

Se realizó un gráfico de Van't Hoff y se determinaron los valores de  $\Delta H_{vh} = 10.571.78 kJ/mol$  y  $\Delta S_{vh} = 0.13373 kJ/molK$ . Estos valores son constantes ya que se está trabajando en un intervalo de temperatura pequeño en el cual no hay dependencias grandes con la temperatura.

La energía libre depende de la temperatura, esta fue calculada a 298K usando los valores obtenidos de  $\Delta H_{vh}$  y  $\Delta S_{vh}$   
 $\Delta G_{vh} = -29.279.96 kJ/mol$

3) En el archivo "Data.txt" se encuentra registrado la variación de la propiedad  $\psi$  como función de la temperatura para el proceso de desplegamiento de la proteína XYZ, es decir el desplegamiento térmico de la misma. Obtenga de esta información experimental los valores de  $\Delta_{unf}G$ ,  $\Delta_{unf}H$  y  $T\Delta_{unf}S$  evaluados a 298 K. Determine también la  $T_m$  de esta proteína.

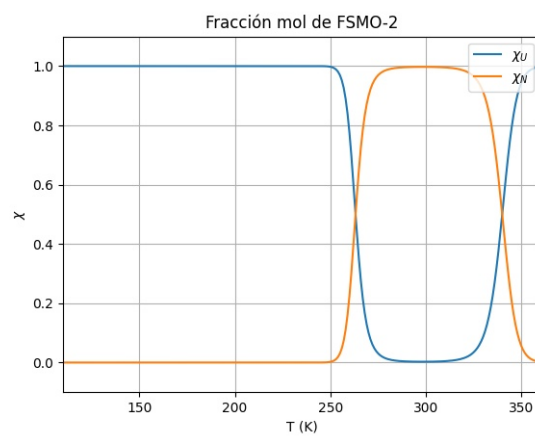
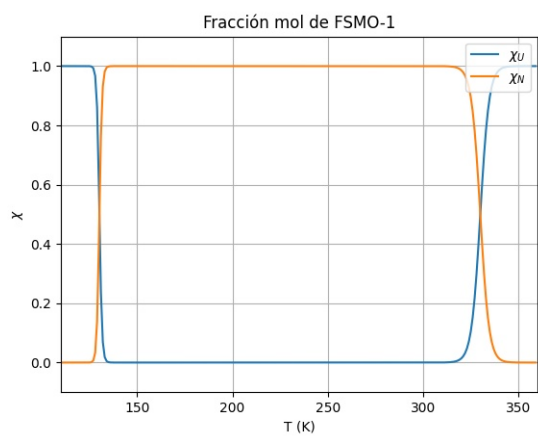
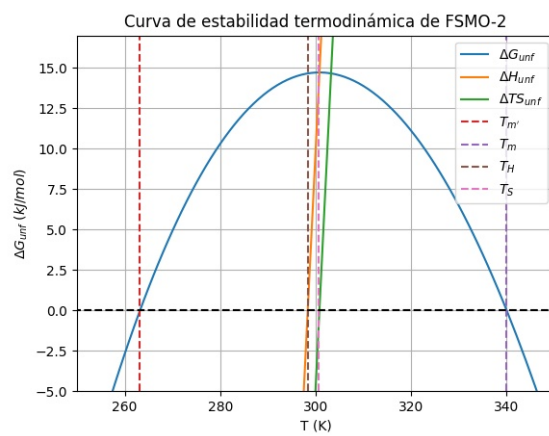
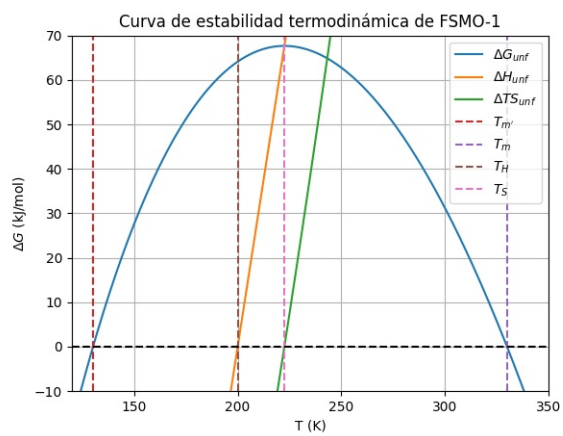
Usando las dos ecuaciones de la recta de las tendencias de cada una de los estados de la proteína observados al medir la propiedad  $\psi$  la cual muestra un cambio en la propiedad al variar la temperatura y fue posible relacionar dichas ecuaciones para determinar la fracción mol con la ecuación 1 y con ello determinar el valor de  $T_m = 339.08 K$  por medio de la gráfica de la fracción mol, esto al tomar la intersección con una recta que cruza por el 0.5 de fracción mol.

$$U = \frac{\Theta - \Theta_N}{\Theta_U - \Theta_N} \quad (1)$$

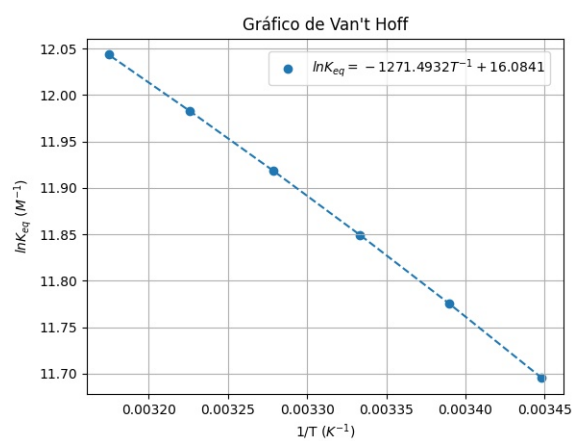
Por medio de considerar el valor de fusión, se tomó un intervalo de 10 grados arriba y abajo para construir un gráfico de Van't Hoff para determinar sus potenciales termodinámicos se obtuvo  $\Delta_{unf}G = 55.872 kJ/mol$ ,  $\Delta_{unf}H = 473.099 kJ/mol$  y  $T_{298}\Delta_{unf}S = 417.223 kJ/mol$ .

## A Gráficas

### Pregunta 1



### Pregunta 2



### Pregunta 3

