

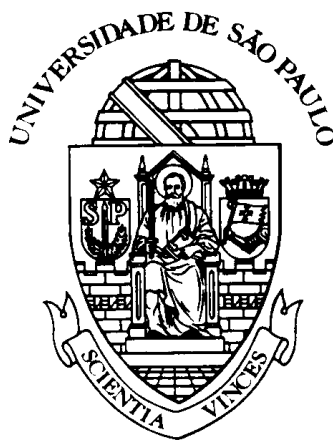
# Termodinâmica metabólica

*Guilherme Menegon Arantes*

*Instituto de Química  
Universidade de São Paulo*

garantes@iq.usp.br

<http://gaznevada.iq.usp.br>



## Termodinâmica “ultra”-básica

- Condições  $(T, p)$  fixas, sem fluxo de energia e matéria
- Dada uma reação hipotética  $aA \rightleftharpoons bB$ , a variação de energia livre é

$$G_{final} - G_{inicial} = \Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[B]^b}{[A]^a}$$

- $\Delta G^\circ$  e razão entre concentrações **determinam sentido** da reação



## Termodinâmica “ultra”-básica

- No equilíbrio,  $\Delta G = 0$ , assim:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_{eq}$$

$$K_{eq} = \frac{[B_{eq}]^b}{[A_{eq}]^a}$$

$K'_{eq}$	$\Delta G^\circ$	
	(kJ/mol)	(kcal/mol)*
$10^3$	-17.1	-4.1
$10^2$	-11.4	-2.7
$10^1$	-5.7	-1.4
1	0.0	0.0
$10^{-1}$	5.7	1.4
$10^{-2}$	11.4	2.7
$10^{-3}$	17.1	4.1
$10^{-4}$	22.8	5.5
$10^{-5}$	28.5	6.8
$10^{-6}$	34.2	8.2

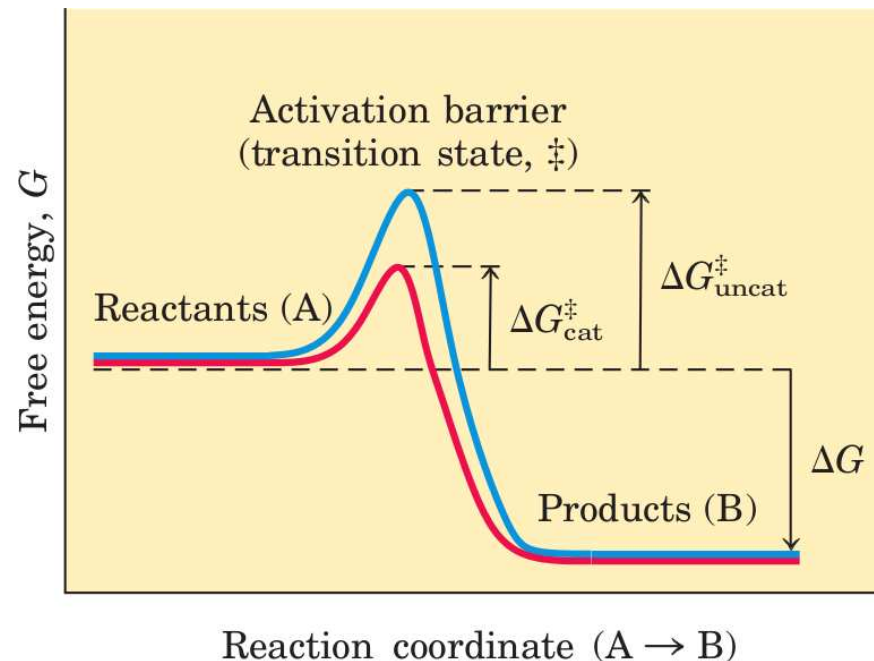
- Lembrem-se que  $G = H - TS$ , onde  $H$  é entalpia ( $U + PV$ ) e  $S$  é entropia
- Mas**, organismos vivos estão fora de equilíbrio, sob constante fluxo de matéria e energia



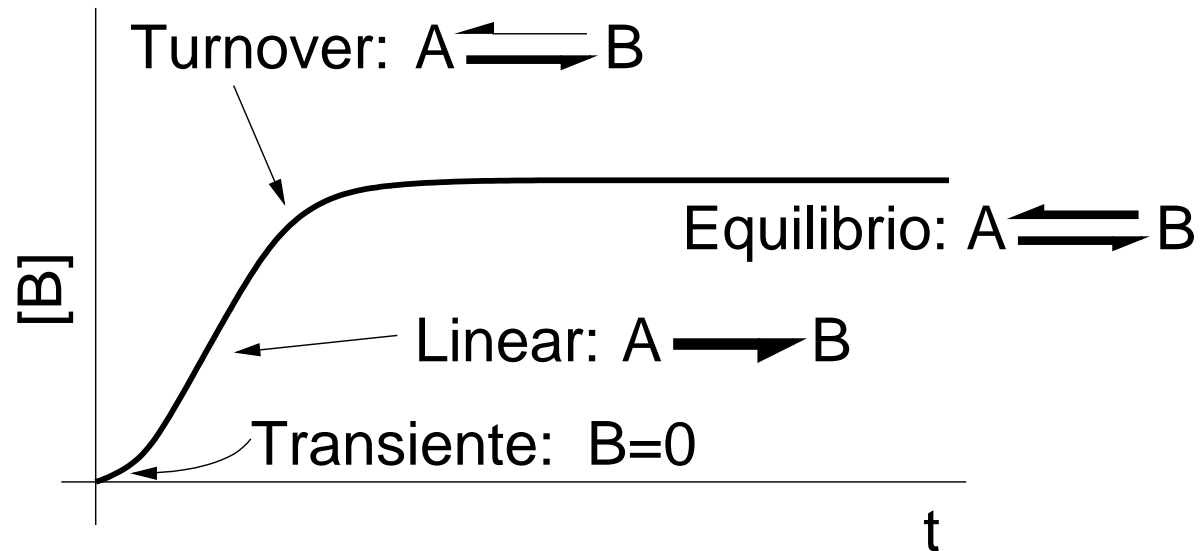
## Cinética química “ultra”-básica

- Dada uma reação hipotética  $aA \rightarrow bB$  que passa por um estado de transição ( $\ddagger$ ), a velocidade é dada por  $v = k_{vel}[A]^a$ . Se definimos,  $\Delta G^\ddagger = G_{\ddagger} - G_A$ , temos

$$k_{vel} = A \exp\left[\frac{-\Delta G^\ddagger}{RT}\right]$$



## Atingindo um equilíbrio químico $A \rightleftharpoons B$



- No equilíbrio, fluxo resultante entre dois estados é, na média, zero. Se:  $Fluxo(A \rightarrow B) = N_a k_{ab}$ , temos:

$$Fluxo(A \rightarrow B) = Fluxo(B \rightarrow A) \iff \frac{N_a}{N_b} = \frac{k_{ba}}{k_{ab}}$$

