

Lista de exercícios 1.

1. Esquematize uma possível geometria e sua curva de interação (energia \times distância, R) para um dímero entre uma molécula de água e outra molécula de:

- (a) NH_3
- (b) N_2

Indique qual(is) força(s) intermolecular(es) contribue(m) principalmente nas regiões em que $R < R_{eq}$, $R \sim R_{eq}$ e $R > R_{eq}$, onde R_{eq} é a distância de equilíbrio do dímero.

2. Esquematize a curva de titulação de 1 L de uma solução de 0,1 M H_3PO_4 com uma solução de 10 M NaOH, colocando pH (eixo y) em função de volume de base adicionada (eixo x). Indicar os pontos na titulação (volume de NaOH) em que o pH equivale a cada um dos $\text{p}K_a$ s do ácido.

3. Discuta como o sistema “tampão” do sangue mantém o pH estável em condições de acidose e de alcalose.

4. Desenhe a estrutura do NaCl no estado sólido e também no estado aquoso. Neste último, destaque suas interações com água.

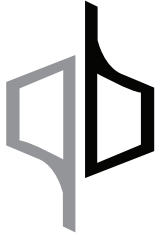
5. ΔG° é característico de cada reação (desde que a temperatura seja constante) e não varia com as concentrações de reagentes e produtos. ΔG , por outro lado, não é característico da reação, podendo assumir qualquer valor em função das concentrações iniciais de reagentes e produtos. Mostre por que estas afirmações são verdadeiras discutindo a expressão que relaciona ΔG° e ΔG .

6. Para reação genérica $A \rightleftharpoons B$, $K_{eq} = 10^3$, responda:

- (a) Qual o valor de ΔG° . No equilíbrio, as concentrações molares de A e B podem variar? Como varia ΔG se as concentrações molares iniciais de $[A]_{ini} \gg [B]_{ini}$?
- (b) Proponha uma condição na qual a reação inversa ($B \rightarrow A$) seja espontânea. Mostre que a sua proposta é possível calculando o respectivo ΔG . Esta questão possui múltiplas respostas ou apenas uma resposta única?
- (c) Se a constante de velocidade de primeira ordem, $k_1 = 10$, qual deve ser o valor da constante k_{-1} para a reação inversa? Para uma mesma K_{eq} , constante de equilíbrio, podem haver múltiplos valores de k_1 e k_{-1} ? Qual a interpretação termodinâmica para a sua resposta?

7. Sobre a molécula de ATP, responda:

- (a) Escreva sua fórmula estrutural e mostre quais grupos podem ser denominados de P_i ?
- (b) Escreva sua equação de hidrólise e balancei-a corretamente. Compare com as equações de hidrólise escritas em livros de bioquímica. Quais as diferenças?
- (c) Qual é o valor de ΔG° para hidrólise do ATP? E do pirofosfato inorgânico (PP_i)?
- (d) Por que sua hidrólise necessita catálise enzimática já que este composto é rico em energia? Utilize-se do gráfico esquemático de variação de G (energia livre) em função de coordenada de reação para responder a esta questão, definindo estado de transição e energia de ativação.



- (e) Por que o ATP é rico em energia livre? Qual as formas do ATP no pH fisiológico? Por que o ATP, em geral, é acompanhado do íon Mg^{2+} ?
- (f) Como ATP pode ser acoplado a outras reações para deslocá-las do equilíbrio? De uma explicação termodinâmica.
8. Mostre as estruturas do NAD, do FAD e do NADP oxidados e reduzidos. Saliente quais grupos das moléculas são oxidados e reduzidos.