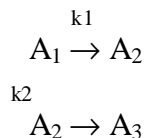


Exercicis proposats per fer amb el KINTECUS

1.- Considera el següent exemple de reaccions consecutives: (0.1 punts)



Analitza els casos següents agafant com interval de temps 10 s:

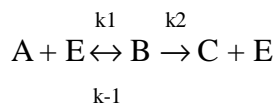
a) $k_1=1$ i $k_2=0.01$, $[A_1]_0=1$ M

b) $k_1=1$ i $k_2=1$, $[A_1]_0=1$ M

c) $k_1=1$ i $k_2=100$, $[A_1]_0=1$ M

Dibuixa les gràfiques de la variació de la concentració de les tres espècies en funció del temps i comenta els resultats.

2.- Considera el següent exemple d'una reacció enzimàtica típica (J.M Goodman *J. Chem. Educ.* **1999**, 76, 275): (0.2 punts)



on A representa el substrate a tracta, E l'enzim, B un intermedi, i C el producte de la catàlisi.

Analitza els casos següents:

a) $k_1=1$, $k_{-1}=0.1$ i $k_2=1.1$, $[E]_0=0.5$ M i $[A]_0=0.5$ durant 10 s.

b) $k_1=1$, $k_{-1}=0.1$ i $k_2=1.1$, $[E]_0=0.2$ M i $[A]_0=0.8$ durant 10 s.

De dues maneres diferents:

1) Resolent numèricament les equacions cinètiques fent servir el programa KINTECUS.

2) Considera ara que com que [A] es troba normalment en excés (en un reacció enzimàtica això és el que passa habitualment) podem fer l'aproximació que $[A]=[A]_0$. Tenint en compte que (i això no és cap aproximació) $[E]=[E]_0-[B]$, planteja l'equació cinètica per l'espècie [B] i integra-la. Un cop tinguis l'expressió per [B] planteja l'equació cinètica per [C] i integra-la.

Representa la [C] vs. t pel cas a i el cas b solucionats segons 1 i 2. En quin cas l'aproximació que es fa en el mètode 2 és més bona? Comenta els resultats.

3.- Resol ara el problema 9 de l'apartat de reaccions complexes de la col·lecció de problemes. Aquest problema és de difícil solució analítica i es tracta de resoldre'l numèricament fent servir el programa KINTECUS. (0.2 punts)

a) Per resoldre l'apartat a del problema considera els valors següents: $k_1=1$, $k_2=10$, $k_3=100$, $[A]_0=[Z]_0=100$ M i $[X]_0=[Y]_0=1$ M

c) Per resoldre l'apartat c considera $k_1=k_2=k_3=1$ i $k_{-1}=k_{-2}=k_{-3}=2$, i $[A]_0=[Z]_0=[X]_0=[Y]_0=1$ M

Comenta els resultats obtinguts i la seva significació des d'un punt de vista biològic.