Ejercicios del Capítulo 2

1. La permitividad relativa o constante dieléctrica de un medio material está relacionada con el momento dipolar y la polarizabilidad de sus moléculas. ¿Qué ecuación o ecuaciones relacionan estos parámetros, ε, μ y α? ¿Depende ε de la temperatura? Justifica la respuesta

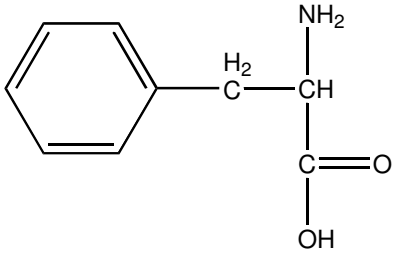
   Nota: Para responder adecuadamente esta pregunta seguramente tendrás que consultar algunos libros de Química Físca (Atkins, Levine, Bertan, Israelachvili...) o de Física (electrostática)

2. En el libro de Debye "Polar molecules" se dan los primeros valores medidos experimentalmente de la polarizabilidad del amoniaco. En la tabla se dan algunos de ellos a diferentes temperaturas. Calcula el valor del momento dipolar y del volumen de polarizabilidad ($\alpha_o / 4\pi\varepsilon_o$) del amoniaco

T(K)	292,2	309,0	333,0	387,0	413,0	446,0
$N_A\alpha/3\varepsilon_o$ (cm^3mol^{-1})	57,57	55,01	51,22	44,99	42,51	39,59

   Nota: para poder realizar este ejercicio necesita tener en cuenta las relaciones y ecuaciones que ha utilizado en el problema anterior.

3. La fenilalanina es uno de los aminoácidos esenciales cuya fórmula estructural está dada mas abajo. ¿Cuál es la energía de interacción entre el grupo fenilo de una molécula y el momento dipolar eléctrico del grupo peptídico de otra molécula de fenilalanina vecina situada a 0,4 nm? Asume que la permitividad del medio es la del vacío.



fenilalanina

μ =1,26 D (del enlace peptídico)

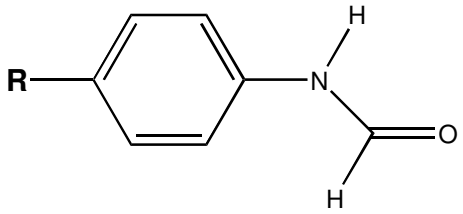
$\alpha_o = 4\pi\varepsilon_o$ 1,04.10^{-29} m^3 (del benceno)

4. (a) Explica el significado de los dos términos del potencial de Lennard-Jones. (b) ¿Qué interacciones engloba el término de las interacciones atractivas? (c) Explica la justificación teórica de cada una de ellas. (d) Calcula el valor de la distancia de mínima energía en función de los parámetros de la función σ y $\in$.

5. Se han medido las constantes de disociación, K_I, de diferentes inhibidores (diferentes valores de R en la fórmula de más abajo) de la quimiotripsina cuyos valores se dan en la tabla

R	CH_3CO	CN	NO_2	CH_3	Cl
π	-0.20	-0.025	0.33	0.5	0.9
log K_I	-1.73	-1.90	-2.43	-2.55	-3.40

¿Existe alguna relación lineal entre log K_I y π? Si es así calcula el valor de la pendiente y de la ordenada en el origen. ¿Cuánto valdrá K_I en el caso de R=H?



Nota: Esto es un ejemplo de como el uso de relaciones de actividad-estructura (structure-activity relation, **SAR**) puede ayudar a mejorar el diseño de fármacos para el tratamiento de enfermedades, ya que facilita la predicción de la actividad biológica de compuestos antes de que estos sean sintetizados. En este caso se pone claramente de manifiesto que la unión de grupos no polares de aminoácidos a los sitios hidrófobos en el interior de las proteínas está gobernado fundamentalmente por interacciones hidrófobas.

El significado de πes el que se establece al final del capítulo 2 para el coeficiente de hidrofobicidad**.**