

**Simulación de un experimento ITC M + A <--> MA, .**  
**Obdulio López Mayorga.**

**#1**

**Volumen de la célula de medida del microcalorímetro:**  $V_c := 0.2 \cdot 10^{-3}$  L

**Datos de los reactivos:**

Concentración inicial de Macromolécula en la célula  
de medida del microcalorímetro.....  $M_0 := 110.0 \cdot 10^{-7}$  M

Concentración inicial de Ligando A en célula .....  $A_0 := 0$  M

Concentración de Ligando A en la jeringa .....  $A_s := 3000 \cdot 10^{-6}$  M

Peso molecular de la Macromolécula .....  $MW := 14093$   $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$

**Parámetros termodinámicos de la reacción:**

Estequiometría, número de sitios para el ligando A .....:  $n := 1$

Constante del equilibrio de unión del ligando A... .....:  $K_A := 58000$  M<sup>-1</sup>

Entalpía de unión ( cal / mol) del ligando A..... .....  $\Delta H_A := -1000$   $\frac{\text{cal}}{\text{mol}}$

$$M_0 \cdot K_A = 6.38$$

**Simulación de un experimento ITC M + A <--> MA,**

**Obdulio López Mayorga**

**#2**

Número de inyecciones ..... N := 27

i := 1..N

Vin<sub>i</sub> := Volumen de cada inyección (L):

0.5 · 10 <sup>-6</sup>
0.8 · 10 <sup>-6</sup>
0.8 · 10 <sup>-6</sup>
0.8 · 10 <sup>-6</sup>
0.8 · 10 <sup>-6</sup>
1.5 · 10 <sup>-6</sup>
1.5 · 10 <sup>-6</sup>
1.5 · 10 <sup>-6</sup>
1.5 · 10 <sup>-6</sup>
1.5 · 10 <sup>-6</sup>
1.5 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2 · 10 <sup>-6</sup>
2.5 · 10 <sup>-6</sup>
2.5 · 10 <sup>-6</sup>
1 · 10 <sup>-6</sup>
1 · 10 <sup>-6</sup>
1 · 10 <sup>-6</sup>

Factor de dilución de una simple inyección:

$$f_i := \exp\left(\frac{-V_{in_i}}{V_c}\right)$$

f<sub>i</sub> =

	0
0	0.9975031224
1	0.9960079893
2	0.9960079893
3	0.9960079893
4	0.9960079893
5	0.9925280548
6	0.9925280548
7	0.9925280548
8	0.9925280548
9	0.9925280548
10	0.9925280548
11	0.9900498337
12	0.9900498337
13	0.9900498337
14	0.9900498337
15	...

Factor de dilución total:

$$f_{t_i} := \exp\left(\frac{-1}{V_c} \cdot \sum_{j=1}^i V_{in_j}\right)$$

f<sub>t<sub>i</sub></sub> =

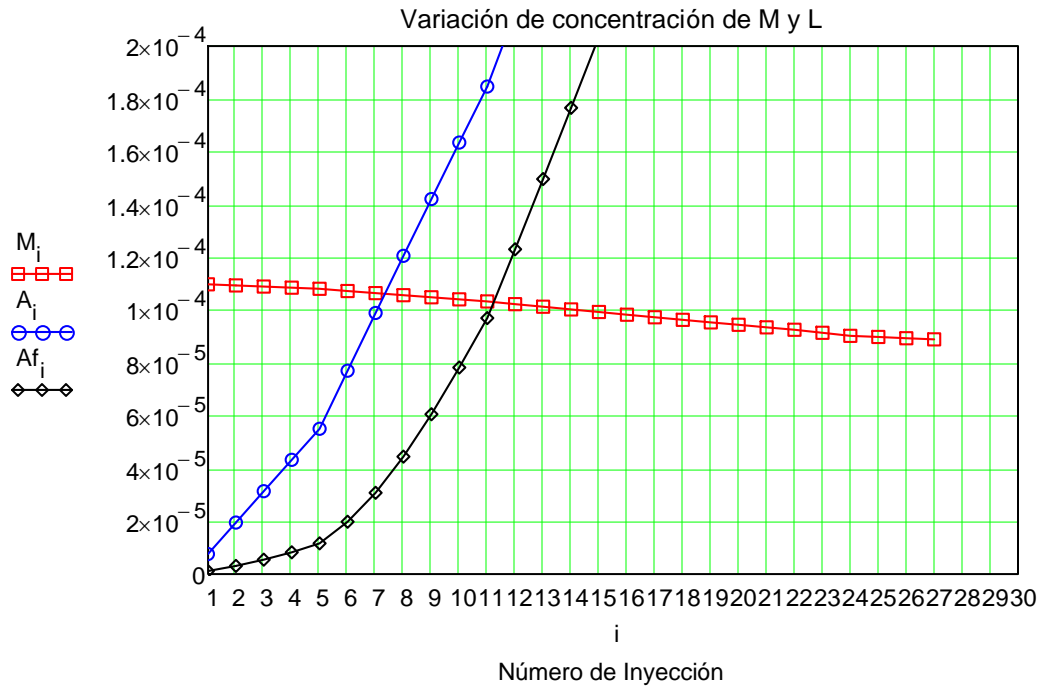
	0
0	0.9975031224
1	0.9935210793
2	0.9895549326
3	0.9856046187
4	0.9816700746
5	0.9743350896
6	0.9670549112
7	0.9598291299
8	0.9526573393
9	0.9455391359
10	0.9384741193
11	0.9291361458
12	0.9198910867
13	0.9107380174
14	0.9016760227
15	...

**Simulación de un experimento ITC  $M + A \leftrightarrow MA_i$**   
**Obdulio López Mayorga** **#3**

Concentraciones en célula (mM):  $M_i := ft_i \cdot M_0$        $A_i := A_S \cdot (1 - ft_i)$

Concentración de ligando libre en célula(M):

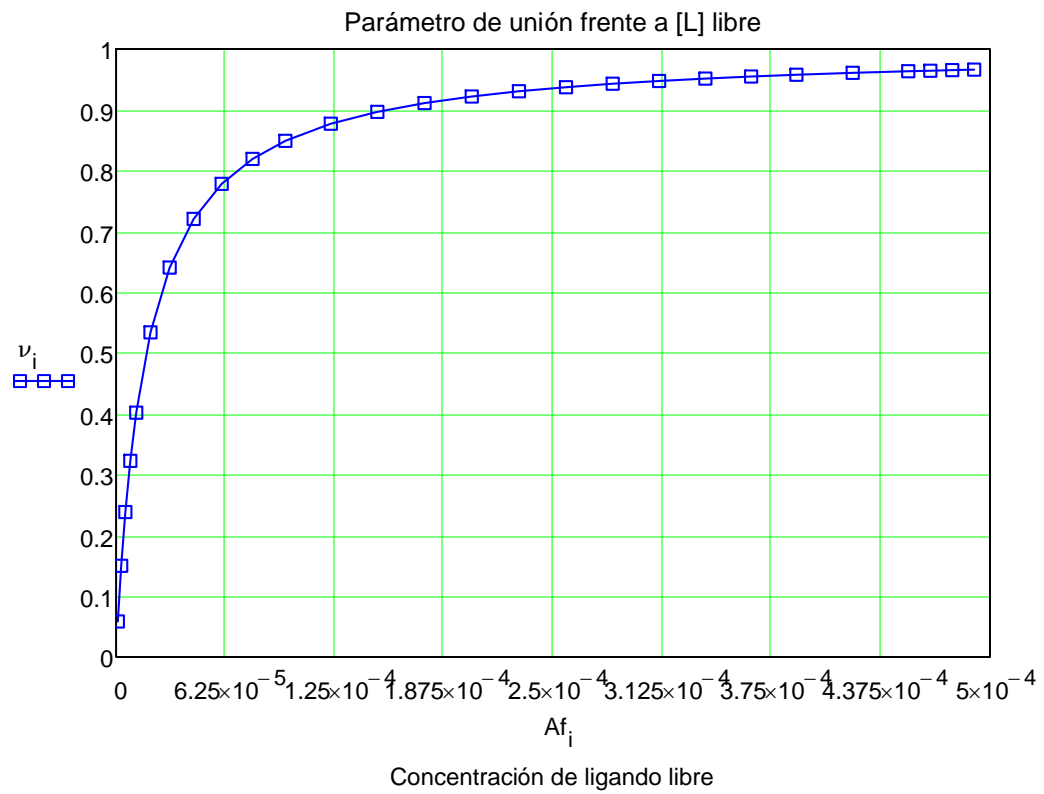
$$Af_i := \frac{(-1 - n \cdot K_A \cdot M_i + K_A \cdot A_i) + \sqrt{(1 + n \cdot K_A \cdot M_i - K_A \cdot A_i)^2 + 4 \cdot K_A \cdot A_i}}{2 \cdot K_A}$$



**Simulación de un experimento ITC M + A <--> MA<sub>n</sub>**  
**Obdulio López Mayorga**

#3

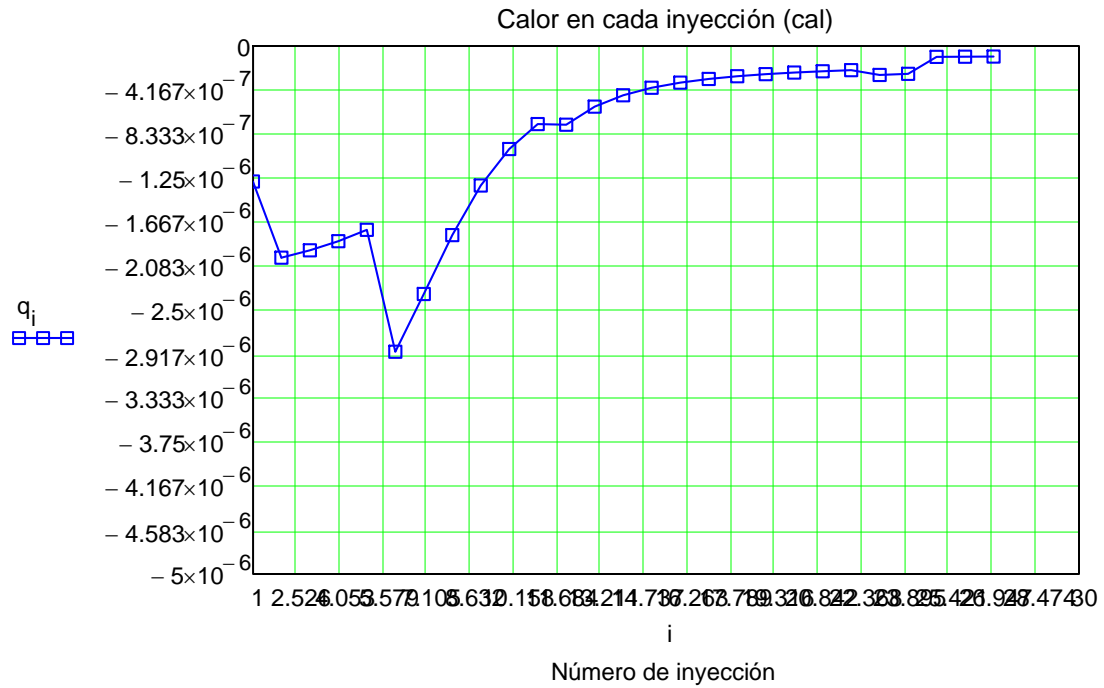
Parámetro de unión: 
$$v_i := \frac{n \cdot K_A \cdot Af_i}{1 + K_A \cdot Af_i}$$



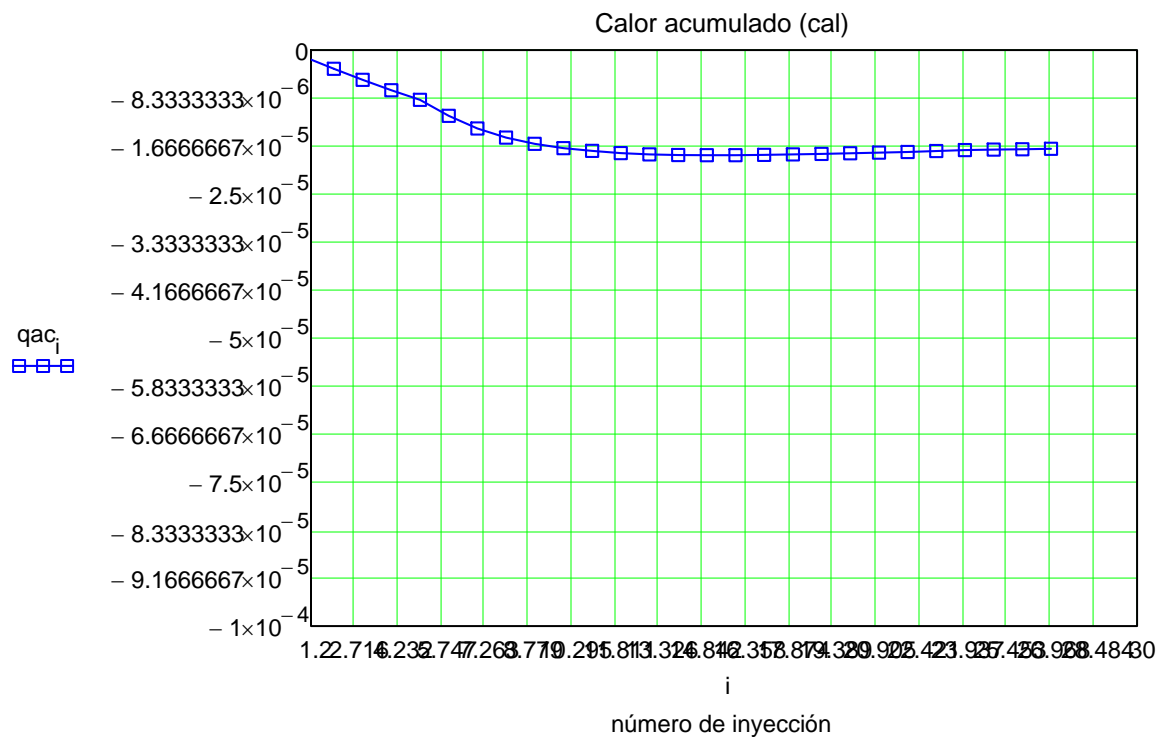
**Simulación de un experimento ITC  $M + A \leftrightarrow MA$**   
**Obdulio López Mayorga**

#4

Calor en cada inyección (cal):  $q_i := Vc \cdot M_i \cdot \Delta H_A \cdot (\nu_i - \nu_{i-1} \cdot f_i)$



Calores acumulados:  $q_{ac_i} := Vc \cdot M_i \cdot \Delta H_A \cdot \nu_i$



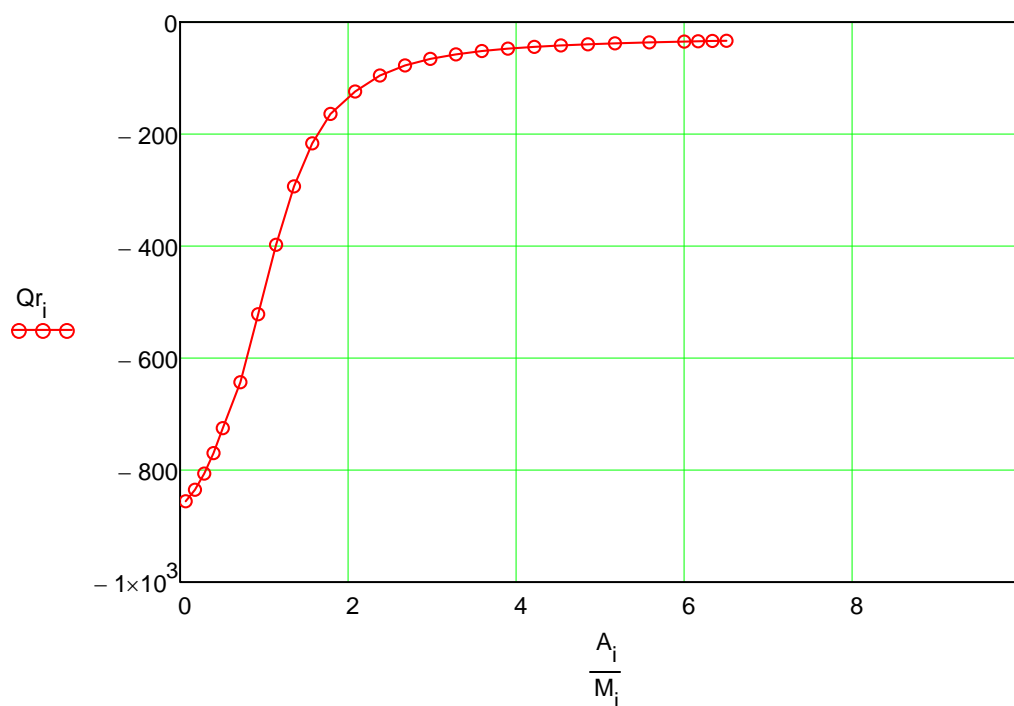
**Simulación de un experimento ITC  $M + A \leftrightarrow MA_1$**

**Obdulio López Mayorga**

**#5**

Calores por mol de A inyectado:

$$Qr_i := \frac{q_i}{A_s \cdot Vin_i}$$



**Simulación de un experimento ITC  $M + A \leftrightarrow MA_i$**   
***Obdulio López Mayorga***

**#6**

**Otros aspectos del experimento.**

Cantidad de macromolécula necesaria:

$$wM := M_0 \cdot Vc \cdot MW \quad wM = 0 \quad g$$

Volúmen total, moles y pesode ligando:

$$Vt := \sum_i V_i n_i \quad Vt = 4.27 \times 10^{-5} L$$

$$nL := Vt \cdot A_s \quad nL = 1.281 \times 10^{-4} \text{ moles}$$

$$w := nL \cdot 1000 \quad w = 1.281 \times 10^{-4} g$$





1 para  $K_B = 1.0 \times 10^6$

$$\Delta Q_{r1_i} =$$

■

2 para  $K_B = 1.0 \times 10^5$

$$\Delta Q_{r2_i} =$$

■

$$V_C \cdot M_i \cdot \Delta H_A =$$

$-2.1945068693 \cdot 10^{-5}$
-------------------------------

-2.1857463745·10 <sup>-5</sup>
-2.1770208516·10 <sup>-5</sup>
-2.1683301612·10 <sup>-5</sup>
-2.1596741641·10 <sup>-5</sup>
-2.1435371971·10 <sup>-5</sup>
-2.1275208047·10 <sup>-5</sup>
-2.1116240859·10 <sup>-5</sup>
-2.0958461465·10 <sup>-5</sup>
-2.080186099·10 <sup>-5</sup>
-2.0646430625·10 <sup>-5</sup>
-2.0440995207·10 <sup>-5</sup>
-2.0237603907·10 <sup>-5</sup>
-2.0036236383·10 <sup>-5</sup>
-1.98368725·10 <sup>-5</sup>
...