

ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES ENTRE MOLÉCULAS MODELO DE LAS PROTEÍNAS Y EL CLORURO DE POTASIO EN CONDICIONES AMBIENTALES

Trabajo Fin de Grado

Grado en Química

Curso 2021-2022

Autora: Marta Gil Cardiel

Directores: Javier Fernández López y Sofía Teresa Blanco Ariño

Departamento de Química Física

Resumen

En este trabajo se estudian las interacciones que surgen entre la glicina (aminoácido usado como molécula modelo de las proteínas) y el electrolito cloruro de potasio (KCl) en disolución acuosa. En primer lugar se estableció el método de medida que asegure la conservación del agua mili-Q desgasificada durante el experimento.

Se tomaron medidas de densidad y velocidad del sonido de disoluciones de glicina en las que el disolvente era agua pura o una disolución acuosa de KCl. Todas ellas se llevaron a cabo a 298,15 K, 293,15 K y 288,15 K y a presión atmosférica.

Estos datos permiten la obtención del volumen molar aparente y la compresibilidad adiabática molar aparente. Los valores que se obtienen del cálculo de estas propiedades indican una elevada interacción soluto-disolvente en las disoluciones.

A partir de estos últimos valores mencionados, se calculan también sus correspondientes propiedades molares aparentes a dilución infinita y las propiedades molares parciales de transferencia a dilución infinita. Con base en los resultados obtenidos se observa una fuerte interacción entre la glicina y el electrolito debida a los grupos cargados de ambos, que son quienes interaccionan. Estas interacciones aumentan al aumentar la concentración del electrolito (cloruro de potasio). También se observa un aumento al disminuir la temperatura.

Por último, se procede al cálculo de los coeficientes de interacción glicina-KCl y glicina-KCl-KCl aplicando la teoría de McMillan y Mayer. Estos muestran que las interacciones glicina-KCl predominan sobre las interacciones glicina-KCl-KCl.

Abstract

In this research work, the interactions between glycine (aminoacid used as model molecule of proteins) and the electrolyte potassium chloride (KCl) in aqueous solution are studied. First of all, a measurement method was established to ensure the conservation of the degassed mili-Q water during the experiment.

Density and sound velocity measurements were taken from solutions of glycine in which the solvent was either pure water or an aqueous KCl solutions. All of them were carried out at 298.15K, 293.15K and 288.15K and at atmospheric pressure.

The values obtained from the calculation of these properties indicate a high solute-solvent interaction in the solutions.

From these last mentioned values, their corresponding apparent molar properties at infinite dilution and the partial molar transfer properties at infinite dilution are also calculated. Based on the results obtained, a strong interaction between glycine and the electrolyte is observed due to the charged groups of both, which interact. These interactions increase with increasing concentration of the electrolyte (potassium chloride). An increase is also observed with decreasing temperature.

Finally, the glycine-KCl and glycine-KCl-KCl interaction coefficients are calculated by applying the McMillan and Mayer theory. These show that glycine-KCl interactions predominate over glycine-KCl-KCl interactions.

Índice

1.Introducción	1
1.1. Glicina	1
1.2. Agua.....	2
1.3. Cloruro de potasio	2
1.4. Propiedades termodinámicas	2
-Densidad, ρ	3
-Velocidad del sonido, u	3
-Temperatura, T	3
-Presión, p	3
1.5. Propiedades molares parciales.	3
1.6. Propiedades molares aparentes.	3
2. Objetivos y planteamiento del trabajo.....	4
3. Parte experimental	5
3.1. Reactivos.....	5
3.2. Aparatos.....	5
3.3. Apreciaciones previas.....	6
3.4. Tiempo de desgasificación y duración del agua mili-Q	7
3.5. Toma de medidas	7
4. Resultados y discusión	8
4.1. Resultados experimentales.....	8
4.2. Volumen molar aparente, V_{ϕ}	9
4.3. Volumen molar aparente a dilución infinita, V_{ϕ}°	12
4.4. Volumen molar parcial de transferencia a dilución infinita, ΔV_{ϕ}°	13
4.5. Compresibilidad adiabática molar aparente, K_{ϕ}	14
4.6. Compresibilidad adiabática molar aparente a dilución infinita, K_{ϕ}°	17
4.7. Compresibilidad adiabática molar parcial de transferencia a dilución infinita, ΔK_{ϕ}°	19
4.8. Coeficientes de interacción soluto-disolvente.....	20
5. Conclusiones	22
6. Bibliografía.....	23

1.Introducción

Las proteínas conforman un grupo de moléculas biológicas compuestas por una o varias cadenas lineales de aminoácidos que se unen mediante un enlace peptídico.¹ Se constituyen fundamentalmente por carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno.

Estas proteínas presentan numerosas funciones las cuales son: estructural (colágeno o queratina), transportadora (hemoglobina), reguladora (insulina), contráctil (actina), de defensa inmunitaria (anticuerpos) y enzimática o biocatalizadora.²

Las principales propiedades de las proteínas son la especificidad y la solubilidad. En cuanto a la especificidad se debe tener en cuenta que las proteínas dependen de la estructura tridimensional que tomen en el medio acuoso, es decir, de los aminoácidos que se encuentran orientados hacia la superficie (forman el centro activo) y los que se orientan a la parte interna (aportan robustez y forma a la proteína). Si se da un mínimo cambio en la secuencia de aminoácidos, esto puede desembocar en cambios en la estructura de la proteína y por tanto en su actividad. En lo que respecta a la solubilidad, las proteínas globulares (forma ovoide) son solubles en agua ya que sus radicales polares se disponen hacia el exterior, por lo que son capaces de formar puentes de hidrógeno con el agua y dar lugar así a una capa de solvatación.³ Estas proteínas globulares permanecen disueltas en los líquidos biológicos por lo que desempeñan sus funciones en disoluciones acuosas salinas.

La proteína puede acabar por desnaturalizarse en caso de que en el medio surjan determinados cambios tales como cambios de temperatura o pH. Esto se traduce en una transformación de la estructura tridimensional original a una extendida y estable. Como consecuencia de esto se da un incremento del contacto entre el disolvente y las zonas hidrofóbicas que desemboca en una pérdida de solubilidad. Este proceso de desnaturalización es, casi siempre, un proceso irreversible.⁴

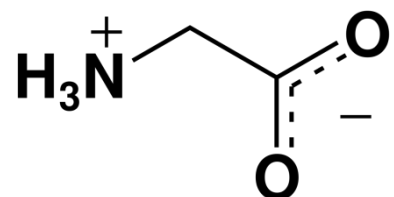
Dado que las estructuras de las proteínas son muy complejas, no resulta fácil el estudio de su interacción con otras moléculas. Sin embargo sí que resulta viable llevar a cabo la investigación con moléculas modelo como pueden ser aminoácidos o péptidos.⁵

1.1. Glicina

En este trabajo se utilizó como molécula modelo el aminoácido glicina. Se trata de un aminoácido no esencial y el único no quiral, cuya fórmula química es $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$.

Este aminoácido se encuentra mayoritariamente en forma de zwitterión en disolución acuosa. La razón es que contiene un grupo ácido y otro básico (lo que significa que es anfótera). Los iones dipolares que se dan en determinados rangos de pH interaccionan de manera intensa con el agua y esto hace que disminuya su volumen. Este aminoácido y sus N-metil derivados se

Figura 1: Glicina (zwitterion)



encuentran en el grupo de los osmolitos de las células que, en condiciones desfavorables, son capaces de estabilizar la conformación natural de proteínas globulares.⁶

1.2. Agua

El agua es el principal componente de los seres vivos. Entre sus propiedades físicas se encuentra la capacidad de solvatar a una enorme cantidad de moléculas tanto orgánicas como inorgánicas gracias a que el agua posee una estructura dipolar. La estructura tanto del agua como de las biomoléculas solvatadas con las que interacciona se encuentra condicionada por dicha interacción.⁷

Además, puede establecer puentes de hidrógeno tanto consigo misma como con otras moléculas, lo que da lugar a la hidrosolubilidad de dichas moléculas.⁸

1.3. Cloruro de potasio

El cloruro de potasio es el electrolito que se usó en este trabajo. Se disocia en sus iones K^+ y Cl^- en disolución acuosa.

Los estudios termodinámicos de proteínas y aminoácidos (como en el caso de este trabajo) presentan un gran interés en el campo de la bioquímica y son necesarios para comprender diversos fenómenos. No solo hay que estudiar su interacción con el agua sino que también es de gran relevancia el estudio de su interacción con las diferentes especies iónicas que se encuentran en las células. El cloruro de potasio es una de estas especies.⁹

1.4. Propiedades termodinámicas

Estas propiedades se clasifican en dos grandes grupos: propiedades extensivas e intensivas. Estas últimas no dependen de la cantidad de materia del sistema y son, por ejemplo, la presión, la temperatura, etc. Sin embargo, las extensivas sí que dependen del tamaño del sistema (masa, volumen).¹⁰

En este trabajo se determinan la densidad y la velocidad del sonido las cuales son propiedades intensivas ambas. Los experimentos se llevan a cabo tanto a presión como a temperatura constante.

-Densidad, ρ

La densidad se define como la masa dividida por el volumen (ambas propiedades extensivas). Su unidad en el SI es kg/m³

$$\rho = \frac{m}{v}$$

-Velocidad del sonido, u

El sonido es una onda de tipo longitudinal. El tipo y las características del material que se atraviesa determinan la velocidad de propagación de esta onda. En fluidos se deben considerar tanto la densidad como la compresibilidad. Si el medio es muy compresible, las moléculas están muy separadas y el sonido se transmite con menor velocidad. En los medios incompresibles el comportamiento será justo el opuesto. En conclusión, a mayor densidad y menor compresibilidad, mayor velocidad del sonido.¹¹ Su unidad en el SI es m/s.

-Temperatura, T

Se realizan los experimentos de este trabajo a tres temperaturas (siempre siguiendo un orden descendente en la toma de medidas) $T=298,15$ K, $T=293,15$ K y $T=288,15$ K. La razón para realizarlo a diferentes temperaturas es estudiar la influencia de la temperatura en las propiedades que se determinan.

Al aumentar la temperatura se produce un aumento de la energía interna de los sistemas lo que provoca un incremento de los choques entre moléculas y por tanto favorece la propagación de la energía de la onda del sonido.¹¹ Sin embargo la temperatura tiene un efecto contrario en la densidad ya que esta disminuye al aumentar la temperatura.

-Presión, p

Todas las medidas de este trabajo se toman a presión atmosférica.

1.5. Propiedades molares parciales.

Estas propiedades se asocian a una variable extensiva.

Se definen como la derivada parcial de una variable extensiva respecto a la variación del número de moles de un determinado constituyente a presión, temperatura y número de moles del resto de constituyentes constantes. Se supone que la masa del sistema es tan grande que la composición no se altera.¹²

1.6. Propiedades molares aparentes.

Estas propiedades se definen con el fin de aislar la contribución de un componente a la no idealidad de la mezcla. Indican el cambio en la propiedad correspondiente del sistema por mol de componente que se añade a la disolución (se supone que las concentraciones del resto de los componentes se mantienen constantes, así como la presión y la temperatura).

Estas propiedades se igualan a sus correspondientes propiedades molares parciales a dilución infinita.¹²

La obtención de los datos de velocidad del sonido y densidad es necesaria para el cálculo del volumen molar aparente y compresibilidad adiabática molar aparente. A partir de estas propiedades se procede al cálculo de los coeficientes de interacción, que es el objetivo final de este trabajo. Estos parámetros se obtienen aplicando la teoría de McMillan y Mayer.¹³

2. Objetivos y planteamiento del trabajo.

Como objetivos generales y comunes a la realización de un trabajo de fin de grado de carácter experimental del graduado/a en Química se encuentran:

- Búsqueda con criterio científico de una bibliografía adecuada así como citarla de manera adecuada en la memoria.
- Aplicación de los conocimientos que se han adquirido a lo largo del grado.
- Trabajo de manera autónoma supervisado por el tutor/a.
- Defensa y conocimiento del contenido del trabajo realizado.

El objetivo principal de este trabajo es, como su propio título indica, el estudio de las interacciones entre moléculas modelos de las proteínas y el cloruro de potasio en disolución acuosa llevado a cabo en condiciones ambientales.

Se tienen en cuenta tanto la concentración del aminoácido (glicina) como la del electrolito (cloruro de potasio), así como la influencia de la temperatura.

Para obtener las conclusiones correspondientes a este estudio de deben realizar una serie de actividades:

- Realizar un estudio experimental en el que se determine la densidad y la velocidad del sonido de una serie de disoluciones acuosas de glicina de concentraciones , 0,2 mol/kg, 0,4 mol/kg, 0,6 mol/kg, 0,8 mol/kg, 1,0 mol/kg en glicina en las que se usa como disolvente disoluciones acuosas de KCl de potasio 0,0 mol/kg, 0,2 mol/kg, 0,4 mol/kg, 0,6 mol/kg, 0,8 mol/kg, 1,0 mol/kg en KCl. Estas medidas se tomarán a presión atmosférica y a las temperaturas de 298,15K, 293,15K y 288,15K (siguiendo este orden descendente de temperaturas).
- Determinar, a partir de los valores de densidad y velocidad del sonido obtenidos experimentalmente, las propiedades que se derivan de estos.
 - Volumen molar aparente, V_φ
 - Volumen molar aparente a dilución infinita, V_φ^0

- Volumen molar parcial de transferencia a dilución infinita ΔV_{φ}^0
- Compresibilidad adiabática molar aparente, K_{φ} ,
- Compresibilidad adiabática molar aparente a dilución infinita, K_{φ}^0
- Compresibilidad adiabática molar parcial de transferencia a dilución infinita, ΔK_{φ} ,
- Estudiar las interacciones existentes entre pares glicina-KCl y tríos glicina-KCl-KCl. Para ello se utiliza la teoría de McMillan y Mayer¹³ según la discusión posterior por parte de Friendman y Krishnan.¹⁴
- Sacar las conclusiones pertinentes a la realización del estudio llevado a cabo en este trabajo.

3. Parte experimental

Se describen a continuación los reactivos y aparatos utilizados para llevar a cabo las medidas de densidad y velocidad del sonido de las disoluciones así como el procedimiento experimental utilizado.

3.1. Reactivos

- Glicina de $\geq 99\%$ de pureza de la marca Sigma. Esta permaneció a lo largo de todo el experimento en un desecador con gel de sílice para evitar la humedad.
- Cloruro de potasio del 99,5% de pureza de la marca Labkem. Se deseca primeramente en una estufa durante varios días después se conserva también en el desecador con el gel de sílice. Al sacarla de la estufa hay que dejar que se enfríe previamente en el desecador.
- Agua mili-Q con resistividad de $18,2 \text{ M}\Omega \cdot \text{cm}$ con la que se preparan las disoluciones. Parte de este trabajo es también la comprobación de forma experimental del tiempo de desgasificación y de la duración de esta agua.

3.2. Aparatos

Los aparatos utilizados fueron los siguientes:

- Balanza Sartorius BP 210 S con una pesada máxima de 210 gramos y resolución de 0,1 miligramos. Se usa para realizar las pesadas de los reactivos necesarios para preparar las disoluciones que se utilizan a lo largo de este trabajo.

- Bomba de vacío necesaria para la desgasificación del agua mili-Q.
- Placa agitadora para la preparación de las disoluciones.
- Placa agitadora y calefactora para la desgasificación del agua mili-Q.
- Para las medidas de densidad y velocidad del sonido se utiliza un densímetro-velocímetro “Anton Par DSA 5000 M 1 Density and sound velocity meter”. Este aparato se calibra previamente a la toma de medidas de las disoluciones. El fabricante proporciona para la densidad una repetibilidad de $0,000001 \text{ g/cm}^3$ y una precisión de $0,000005 \text{ g/cm}^3$. Para la velocidad del sonido se da una repetibilidad de $0,1 \text{ m/s}$ y una precisión de $0,5 \text{ m/s}$.

Este aparato mide simultáneamente la velocidad del sonido y la densidad. La muestra se introduce en un tubo vibrante en forma de U, siendo la frecuencia de vibración de este tubo lo que permite obtener los datos de la densidad de las disoluciones. Junto al tubo se sitúa un transmisor ultrasónico que es el responsable de la obtención de los valores de velocidad del sonido.

3.3. Apreciaciones previas

A la hora de realizar medidas con el aparato usado en este trabajo se debe tener en cuenta que la posible formación de burbujas es un hecho que produciría resultados anómalos en las medidas, por lo que hay que evitarlas a toda costa. Para ello el agua mili-Q que se usa para preparar las disoluciones se desgasifica previamente. Se comprueba experimentalmente el tiempo necesario para la desgasificación del agua y el tiempo que durará esta agua desgasificada. Otro aspecto importante para evitar la formación de burbujas es que al tomarse las medidas a tres temperaturas diferentes, estas se harán con temperaturas descendentes, es decir, primero a $298,15 \text{ K}$, después a $293,15 \text{ K}$ y por último a $288,15 \text{ K}$.

Muy importante es también la forma en la que se introduce la muestra en el tubo del densímetro-velocímetro. Se introduce mediante una jeringa en la que hay que asegurarse de que no haya ninguna burbuja de aire en su interior y de que contenga una cantidad suficiente de muestra que permita la homogeneización del tubo.

Se debe realizar entre cada medida una limpieza de este tubo del densímetro, para ello se introduce en primer lugar agua y posteriormente acetona. Por último se introduce aire durante aproximadamente siete minutos para asegurarse de que el tubo queda completamente seco.

Cada una de estas medidas se realiza tres veces y el resultado de la media de estos valores es el que se utiliza para calcular los parámetros de este trabajo.

3.4. Tiempo de desgasificación y duración del agua mili-Q

Como se acaba de mencionar en la sección anterior, el agua mili-Q debe ser desgasificada previamente para evitar la formación de burbujas.

Para averiguar cuál es el tiempo necesario durante el que se debe realizar dicha desgasificación se tomó el agua mili-Q y se realizó una primera medida de la densidad y velocidad del sonido de esta agua sin desgasificar a las temperaturas de 298,15 K, 293,15 K y 288,15 K. Posteriormente se tomaron medidas de agua mili-Q desgasificada durante media hora, una hora, una hora y media y dos horas también a las tres temperaturas. Los valores obtenidos se compararon con los bibliográficos.^{15 16}

Estos resultados se recogen en las tablas A1 y A2 y en las figuras A1 y A2 del anexo. En ellas se puede observar que basta con desgasificar el agua durante media hora para que los valores de las propiedades estén en el rango de los admitidos por el error del aparato utilizado.

En cuanto a la duración del agua mili-Q desgasificada, para averiguar durante cuánto tiempo se puede usar, se tomaron medidas de la misma diariamente y se compararon los resultados con los bibliográficos.^{15 16}

En un primer momento se llegó a la conclusión de que el agua duraba desgasificada 24 horas pero al ir realizando las medidas a varias concentraciones se observó que se producían datos anómalos y que esto era porque el agua no duraba 24 horas desgasificada sino menos tiempo por lo que solo se podía usar en el mismo día en el que había sido desgasificada. Para solucionar este problema y no tener que desgasificar agua mili-Q cada día se comprobó que al realizar la desgasificación del agua en caliente con agitación durante media hora se aumentaba el tiempo de duración del agua desgasificada.

Los resultados de la desgasificación en caliente se recogen en las tablas A3 y A4 y en las figuras A3 y A4. En ellas se puede observar que al proceder de esta forma se aumenta el tiempo que dura el agua mili-Q desgasificada pudiéndose usar hasta tres días.

3.5. Toma de medidas

Para realizar la toma de medidas de las disoluciones a estudiar, se preparó en primer lugar el disolvente (disolución acuosa de cloruro de potasio, el cual lo tendremos con diferentes concentraciones: agua pura, 0,2 mol/kg, 0,4 mol/kg, 0,6 mol/kg, 0,8 mol/kg y 1,0 mol/kg) que debe ser agitado antes de la preparación de cada disolución de glicina para asegurar la homogeneidad de la muestra. Este disolvente se midió tanto antes como después de usarse para asegurarse de que se había conservado a lo largo de la toma de medidas

Una vez se tuvo el disolvente preparado se disolvió la cantidad adecuada de glicina para las diferentes molalidades que se querían obtener. Cada disolución se agitó en una placa con un núcleo magnético durante al menos diez minutos y se midió inmediatamente después de ser preparada ya que se comprobó experimentalmente que estas disoluciones no podían ser conservadas. La agitación debe ser lenta de modo que se evite que se formen burbujas.

Las medidas se tomaron a tres temperaturas diferentes, 298,15 K, 293,15 K y 288,15 K y por triplicado cada una de ellas. Para evitar la formación de burbujas se comienza por la más alta y se concluye con la más baja.

4. Resultados y discusión

4.1. Resultados experimentales

En este trabajo estudiaron las interacciones entre la glicina y cloruro de potasio en condiciones ambientales llevando a cabo medidas de densidad, ρ , y de velocidad del sonido, u , de las diferentes disoluciones de las que se dispone. De cada una de estas medidas se efectuaron tres réplicas de modo que se comprueba así la repetibilidad de los resultados que se obtienen.

En las tablas A5-A10 y gráficas A5-A10 del anexo se recogen los datos que se obtuvieron de manera experimental en este trabajo para las diferentes concentraciones de glicina y cloruro de potasio.

Se observa que la velocidad del sonido experimenta un aumento con la temperatura, la concentración de glicina y la concentración de la disolución de cloruro de potasio usado como disolvente mientras que la densidad experimenta igualmente, un aumento tanto con la concentración de glicina como con la concentración de cloruro de potasio pero no así con la temperatura, que provoca un descenso de estos valores.

Los resultados obtenidos se compararon con los bibliográficos de Soto et al (1998)¹⁷ donde se proporcionan datos de densidades y velocidades del sonido a distintas concentraciones de glicina (entre 0 y 3 mol/kg) haciendo uso de agua o disoluciones de cloruro de potasio, las cuales tienen las mismas molalidades que las utilizadas durante este trabajo, como disolvente (Figuras A5-A10). Se observa que los valores coinciden en los rangos estudiados en este trabajo. Sin embargo, la extrapolación de los valores de este trabajo a concentraciones superiores de glicina conduce a valores superiores que los reportados por Soto et al, tanto en densidad como en velocidad del sonido. En cualquier caso, los datos de este trabajo son más adecuados para el cálculo de las propiedades a dilución infinita, ya que aportan más puntos experimentales en la zona de baja concentración de glicina. Los ajustes lineales son, además, mejores para los datos de este trabajo que para los de Soto et al, que abarcan un rango más amplio de concentraciones de glicina (figuras A5-A10).

A continuación se procede al cálculo de distintas propiedades derivadas mediante los datos obtenidos experimentalmente. De estas propiedades podrá deducirse información acerca de las interacciones en los sistemas estudiados.

4.2. Volumen molar aparente, V_ϕ

El volumen molar aparente de la glicina en agua y en disoluciones acuosas de cloruro de potasio viene dado por la siguiente ecuación.¹⁷

$$V_\phi = \frac{M}{\rho} - \frac{\rho - \rho_0}{m \rho \rho_0} \quad (1)$$

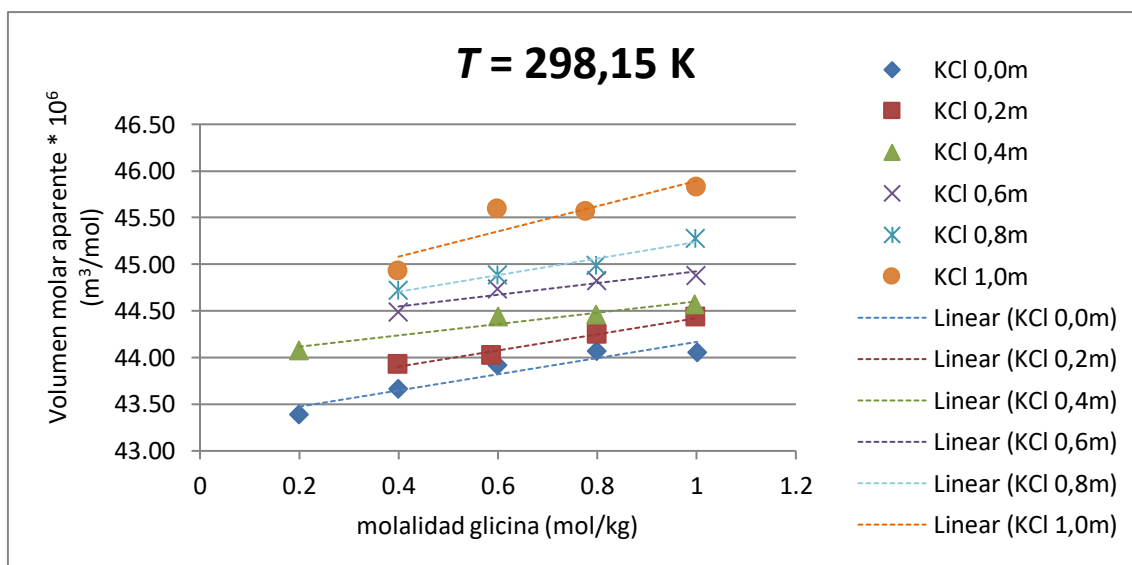
en la cual M es la masa molar del aminoácido, m la molalidad de la glicina, ρ_0 la densidad del disolvente y ρ la densidad de la disolución.

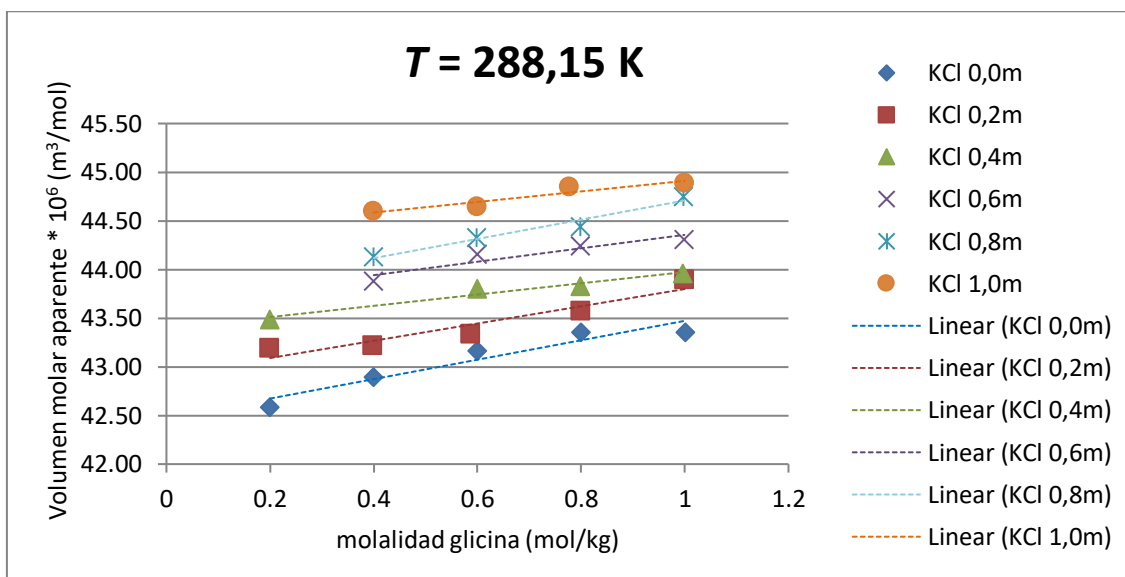
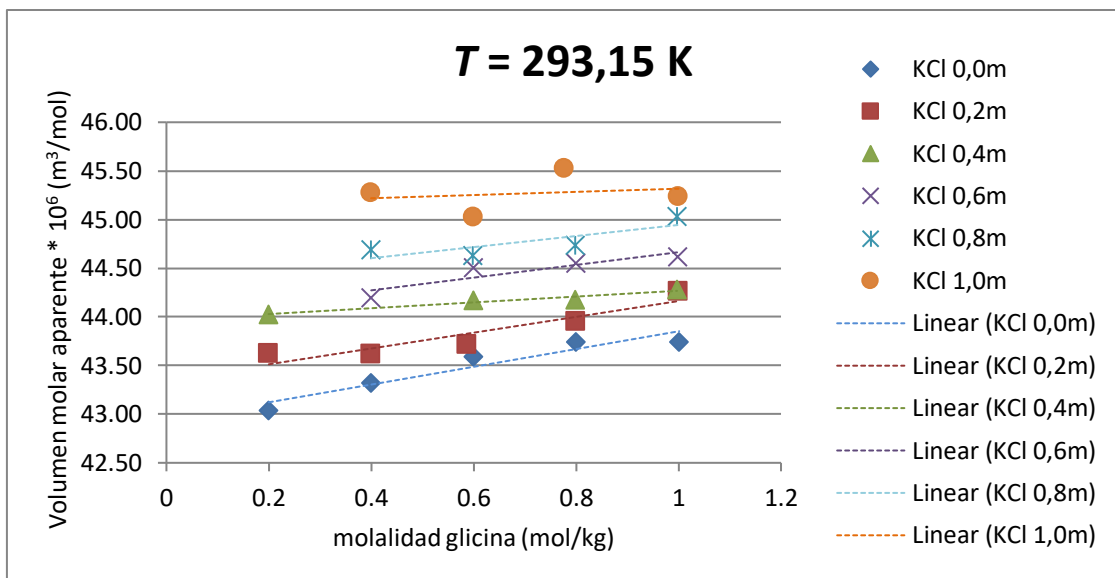
Tabla 1: Volumen molar aparente V_ϕ , a $T = 298,15$ K, $T = 293,15$ K y $T = 288,15$ K y a presión atmosférica, para las distintas concentraciones de glicina y cloruro de potasio.

Molalidad glicina (mol/kg)	$V_\phi \cdot 10^6$ (m ³ /mol)		
	$T = 298,15$ K	$T = 293,15$ K	$T = 288,15$ K
Molalidad KCl (mol/kg) = 0,0			
0,2001	43,39	43,04	42,59
0,4000	43,66	43,32	42,90
0,5997	43,92	43,59	43,17
0,7999	44,07	43,75	43,36
1,0012	44,06	43,74	43,36
Molalidad KCl (mol/kg) = 0,2			
0,1999	43,94	43,62	43,19
0,3993	43,93	43,62	43,22
0,5879	44,03	43,72	43,33
0,8001	44,25	43,96	43,57
0,9998	44,43	44,26	43,90
Molalidad KCl (mol/kg) = 0,4			
0,1994	44,08	44,03	43,49
0,3988	44,69	44,60	43,96
0,6002	44,44	44,17	43,80
0,7986	44,46	44,18	43,83
0,997	44,57	44,28	43,96
Molalidad KCl (mol/kg) = 0,6			
0,2012	44,72	44,40	44,09
0,3999	44,49	44,20	43,88
0,5999	44,74	44,51	44,16
0,7993	44,83	44,55	44,24
0,9992	44,88	44,62	44,31

Molalidad KCl (mol/kg) = 0,8			
0,2096	46,97	47,76	46,56
0,3999	44,72	44,69	44,13
0,5989	44,89	44,63	44,33
0,7984	44,99	44,74	44,44
0,9979	45,28	45,03	44,75
Molalidad KCl (mol/kg) = 1,0			
0,2012	47,58	48,85	47,91
0,3995	44,93	45,28	44,60
0,5999	45,60	45,03	44,64
0,7775	45,57	45,53	44,85
0,9999	45,83	45,24	44,89

Figura 2: Representación gráfica del volumen molar aparente, V_ϕ , a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 293,15\text{ K}$ y a presión atmosférica, para las distintas concentraciones de glicina y cloruro de potasio.





Los valores resultantes del cálculo de V_ϕ se muestran en la Tabla 1 y son todos positivos, lo que indica que existen interacciones atractivas entre el soluto y el disolvente. Además estos valores experimentan un aumento progresivo conforme aumentan la temperatura, la molalidad de la glicina o la del cloruro de potasio. Esta tendencia ascendente se puede apreciar en las gráficas de la figura 2. Los puntos experimentales que conducen a resultados anómalos se han despreciado.

Estos resultados indican que la glicina se disocia en sus correspondientes grupos amino y carbonilo en disoluciones acuosas quedando cargados el grupo amino de forma positiva y el carbonilo negativa, de tal forma que esto posibilita la formación de pares iónicos con los iones del cloruro de potasio (el electrolito). Este hecho provoca que el tamaño de las moléculas de glicina por término medio aumente en las disoluciones conforme aumenta la concentración de cloruro de potasio.

El volumen molar aparente varía linealmente con la molalidad de glicina en agua y en disoluciones acuosas de KCl, según la ecuación ¹⁷:

$$V_{\phi} = V_{\phi}^{\circ} + X_V * m \quad (2)$$

donde la ordenada en el origen es el volumen molar aparente a dilución infinita, V_{ϕ}° , m es la molalidad de glicina y X_V corresponde a la pendiente de la recta.

4.3. Volumen molar aparente a dilución infinita, V_{ϕ}°

Las interacciones soluto-disolvente se ven reflejadas en el parámetro V_{ϕ}° mientras que es el parámetro X_V el que proporciona la información acerca de las interacciones soluto-soluto.

Tabla 2: Volumen molar aparente a dilución infinita, V_{ϕ}° , y pendientes de la ecuación (2), X_V , calculados mediante ajuste lineal junto con sus respectivas incertidumbres, para las distintas molalidades de cloruro de potasio a $T = 298,15\text{K}$, $T = 293,15$ y $T = 288,15\text{K}$.

$T = 298,15 \text{ K}$				
$m \text{ (KCl)}$ (mol/kg)	$V_{\phi}^{\circ} * 10^6$ (m ³ /mol)	Error de $V_{\phi}^{\circ} * 10^6$ (m ³ /mol)	$X_V * 10^6$ (kg*m ³ /mol ²)	Error de $X_V * 10^6$ (kg*m ³ /mol ²)
0,0	43,3	± 0,11	0,867	± 0,169
0,2	43,56	± 0,06	0,865	± 0,077
0,4	43,99	± 0,08	0,607	± 0,118
0,6	44,29	± 0,12	0,627	± 0,159
0,8	44,35	± 0,10	0,89	± 0,138
1,0	44,54	± 0,35	1,352	± 0,474

$T = 293,15 \text{ K}$				
$m \text{ (KCl)}$ (mol/kg)	$V_{\phi}^{\circ} * 10^6$ (m ³ /mol)	Error de $V_{\phi}^{\circ} * 10^6$ (m ³ /mol)	$X_V * 10^6$ (kg*m ³ /mol ²)	Error de $X_V * 10^6$ (kg*m ³ /mol ²)
0,0	42,94	± 0,12	0,912	± 0,174
0,2	43,35	± 0,12	0,812	± 0,181
0,4	43,97	± 0,03	0,3	± 0,049
0,6	44,01	± 0,16	0,653	± 0,217
0,8	44,38	± 0,21	0,569	± 0,285
1,0	45,15	± 0,40	0,164	± 0,554

$T = 288,15 \text{ K}$				
$m \text{ (KCl)}$ (mol/kg)	$V_{\varphi}^{\circ} * 10^6$ (m ³ /mol)	Error de $V_{\varphi}^{\circ} * 10^6$ (m ³ /mol)	$X_V * 10^6$ (kg*m ³ /mol ²)	Error de $X_V * 10^6$ (kg*m ³ /mol ²)
0,0	42,47	$\pm 0,12$	0,998	$\pm 0,176$
0,2	42,91	$\pm 0,11$	0,886	$\pm 0,170$
0,4	43,4	$\pm 0,06$	0,579	$\pm 0,085$
0,6	43,67	$\pm 0,13$	0,691	$\pm 0,179$
0,8	43,72	$\pm 0,09$	0,988	$\pm 0,129$
1,0	44,37	$\pm 0,09$	0,542	$\pm 0,130$

Como se puede observar en los resultados presentados en la Tabla 2, el volumen molar aparente a dilución infinita tiene valores positivos. Estos valores son considerablemente mayores que los de las pendientes, lo que demuestra que las interacciones soluto-disolvente (glicinia-cloruro de potasio) son mayores que las soluto-soluto (glicina-glicina). Los valores mostrados para la pendiente son bastante irregulares, no muestran una tendencia ascendente o descendente por ejemplo, esto se debe a que las interacciones glicina-glicina están condicionadas por un gran número de factores.

Con respecto al valor de V_{φ}° , se observa un aumento de este parámetro al aumentar la concentración de glicina, la concentración de cloruro de potasio y la temperatura (misma situación que se encuentra cuando se estudia el volumen molar aparente).

El aumento de V_{φ}° con la temperatura es debido a que se pierden moléculas del disolvente que constituye la capa de solvatación, lo que lleva a una disminución del fenómeno de electrostricción..

4.4. Volumen molar parcial de transferencia a dilución infinita, $\Delta V_{\varphi}^{\circ}$

A dilución infinita, una propiedad molar aparente coincide con su correspondiente propiedad molar parcial.

Para la propiedad que nos concierne, por lo tanto, el volumen molar parcial llega a ser igual al volumen molar aparente a dilución infinita. De esta forma se puede obtener el volumen molar parcial de transferencia a dilución infinita, $\Delta V_{\varphi}^{\circ}$, mediante la siguiente expresión: ¹⁹

$$\Delta V_{\varphi}^{\circ} = V_{\varphi}^{\circ} \text{ (en disolución acuosa de KCl)} - V_{\varphi}^{\circ} \text{ (en agua)} \quad (3)$$

Tabla 3: Volumen de transferencia a dilución infinita, ΔV_{ϕ}^o , a $T = 298,15$ K, $T = 293,15$ K y $T = 288,15$ K, a presión atmosférica, para las distintas concentraciones de cloruro de potasio.

Molalidad KCl (mol/kg)	$\Delta V_{\phi}^o * 10^6$ (m ³ /mol)		
	$T = 298,15$ K	$T = 293,15$ K	$T = 288,15$ K
0,2	0,26	0,41	0,44
0,4	0,69	1,03	0,93
0,6	0,99	1,07	1,20
0,8	1,05	1,44	1,25
1,0	1,24	2,21	1,90

El volumen molar parcial de transferencia de un aminoácido a dilución infinita se puede entender como la suma del volumen de contracción debida a electrostricción, del volumen asociado a los huecos y del volumen de Van der Waals.¹⁸

Se considera que el electrolito no afecta a los dos últimos términos mencionados y se concluye así, que los valores positivos de ΔV_{ϕ}^o obtenidos, que se recogen en la Tabla 3, y su correspondiente incremento cuando aumenta la concentración de cloruro de potasio, son consecuencia de la disminución del volumen de contracción.

En conclusión, las interacciones electrostáticas directas entre los iones del electrolito, K^+ y Cl^- , con los grupos iónicos de la glicina, NH_3^+ y COO^- , explican estos resultados obtenidos.

Una causa directa de esto es que la electrostricción de las moléculas del disolvente disminuye y desemboca en una disminución del volumen de contracción.

4.5. Compresibilidad adiabática molar aparente, K_{ϕ}

La compresibilidad adiabática molar aparente, K_{ϕ} , en agua o disolución acuosa de cloruro de potasio viene dada por la siguiente ecuación:¹⁷

$$K_{\phi} = \frac{M\kappa_S}{\rho} - \frac{\kappa_{S0}\rho - \kappa_S\rho_0}{m\rho\rho_0} \quad (4)$$

Donde M es la masa molar del aminoácido, m la molalidad de la glicina en disolución acuosa de cloruro de potasio, ρ_0 la densidad del disolvente, ρ la densidad del aminoácido en la disolución, κ_S^0 la compresibilidad isoentrópica del disolvente y κ_{S0} la compresibilidad isoentrópica de la disolución.

Para el cálculo de κ_S^0 y κ_S se ha de aplicar la siguiente ecuación¹⁷:

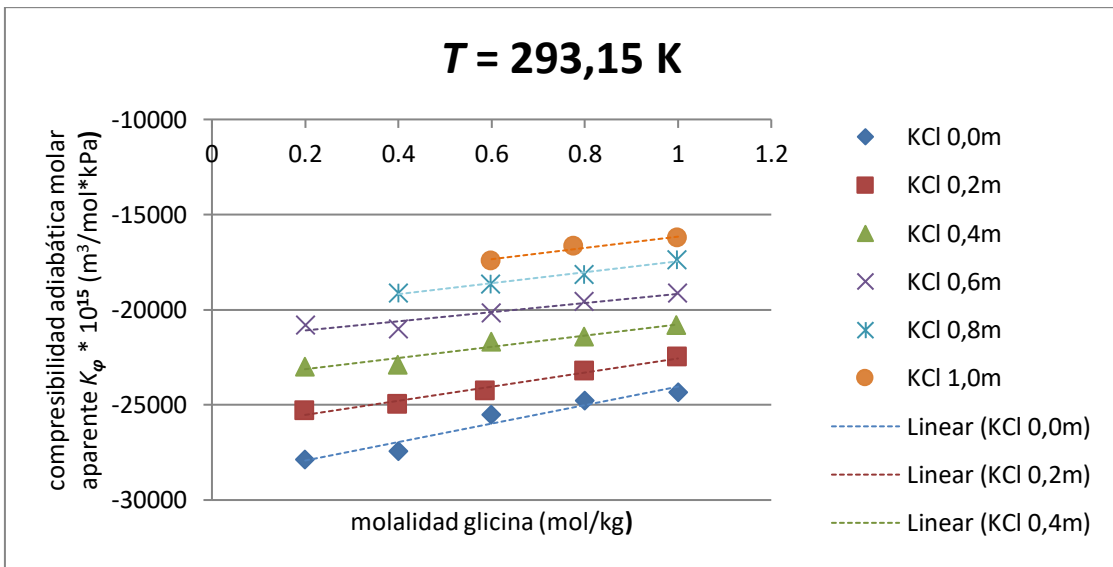
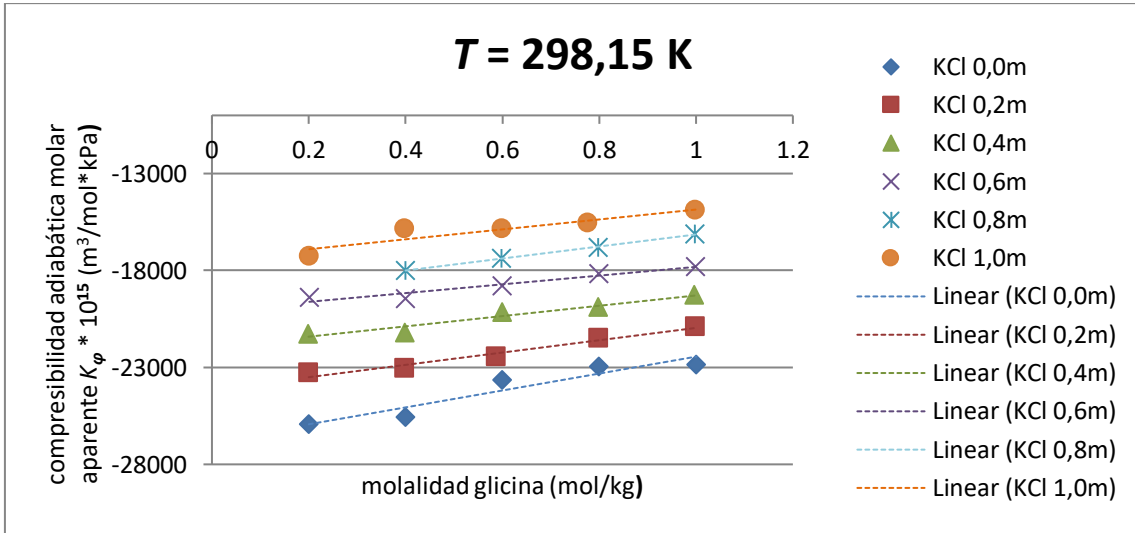
$$k_s = 1 / \rho u^2 \quad (5)$$

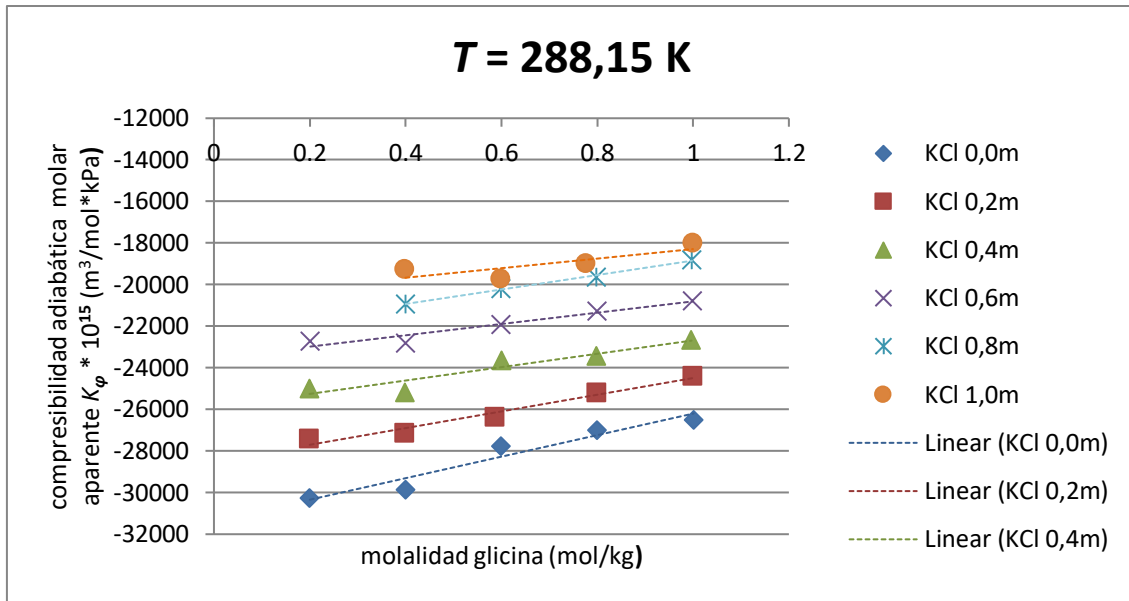
donde u es la velocidad del sonido u y el subíndice o se refiere al disolvente

Tabla 4: Compresibilidad adiabática molar aparente, K_ϕ , a $T = 298,15$ K, $T = 293,15$ K y $T = 288,15$ K y a presión atmosférica, para las distintas concentraciones de cloruro de potasio.

Molalidad glicina (mol/kg)	$K_\phi \cdot 10^{15} \text{ (m}^3/\text{kPa}\cdot\text{mol)}$		
	$T = 298,15$ K	$T = 293,15$ K	$T = 288,15$ K
Molalidad KCl (mol/kg) = 0,0			
0,2001	-25923,97	-27864,95	-30248,91
0,4000	-25559,51	-27430,47	-29848,28
0,5997	-23640,21	-25500,75	-27769,48
0,7999	-22957,12	-24786,33	-26990,82
1,0012	-22857,82	-24329,05	-26497,94
Molalidad KCl (mol/kg) = 0,2			
0,1999	-23297,74	-25317,16	-27432,65
0,3993	-23049,94	-24971,28	-27144,00
0,5879	-22454,14	-24264,49	-26364,83
0,8001	-21504,74	-23223,70	-25194,27
0,9998	-20897,50	-22488,97	-24401,98
Molalidad KCl (mol/kg) = 0,4			
0,1994	-21263,05	-22986,08	-24981,80
0,3988	-21196,21	-22890,32	-25165,66
0,6002	-20155,61	-21670,17	-23634,68
0,7986	-19888,05	-21422,88	-23433,27
0,997	-19267,29	-20788,19	-22643,60
Molalidad KCl (mol/kg) = 0,6			
0,2012	-19382,24	-20800,19	-22712,23
0,3999	-19467,36	-20997,69	-22797,42
0,5999	-18787,27	-20159,85	-21924,96
0,7993	-18151,42	-19555,57	-21268,81
0,9992	-17790,86	-19127,24	-20764,08
Molalidad KCl (mol/kg) = 0,8			
0,2096	-16268,94	-17177,71	-19578,52
0,3999	-18000,49	-19122,65	-20932,55
0,5989	-17361,79	-18645,88	-20186,01
0,7984	-16817,17	-18135,78	-19636,75
0,9979	-16121,72	-17381,54	-18806,76
Molalidad KCl (mol/kg) = 1,0			
0,2012	-17282,50	-14985,46	-17385,48
0,3995	-15839,45	-16145,78	-19260,60
0,5999	-15867,69	-17425,75	-19713,20
0,7775	-15565,78	-16672,46	-19001,34
0,9999	-14901,29	-16224,93	-17995,71

Figura 3: Representación gráfica de la compresibilidad adiabática molar aparente, K_ϕ , a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 293,15\text{ K}$ y a presión atmosférica, para las distintas concentraciones de glicina y cloruro de potasio.





Todos los valores de K_ϕ obtenidos son negativos para todo el rango de concentraciones tanto de glicina como de cloruro de potasio. Estos valores aumentan (es decir, se hacen menos negativos) al aumentar la concentración del electrolito, KCl.

Algunos puntos con valores anómalos fueron eliminados de la gráfica para mejorar la tendencia del ajuste lineal. Estos valores anómalos se deben a errores de tipo experimental.

4.6. Compresibilidad adiabática molar aparente a dilución infinita, K_ϕ^0

Para obtener los valores de compresibilidad adiabática molar aparente se sigue un procedimiento de extrapolación análogo al que se ha usado anteriormente para el cálculo del volumen molar aparente a dilución infinita:¹⁷

$$K_\phi = K_\phi^0 + X_S \cdot m \quad (6)$$

donde m es la molalidad de la glicina, K_ϕ^0 es la compresibilidad molar aparente adiabática a dilución infinita y X_S corresponde a la pendiente de la recta.

Tabla 5: Compresibilidad adiabática molar aparente a dilución infinita, K_ϕ^0 , y pendientes de la ecuación (6), X_s , calculados mediante ajuste lineal junto con sus respectivas incertidumbres, para las distintas molalidades de cloruro de potasio a $T = 298,15$ K, $T = 293,15$ K y $T = 288,15$ K.

$T = 298,15$ K				
m (KCl) (mol/kg)	$K_\phi^0 * 10^{15}$ (m ³ /kPa*mol)	Error de $K_\phi^0 * 10^{15}$ (m ³ /kPa*mol)	$X_s * 10^{15}$ (kg*m ³ /kPa*mol ²)	Error de $X_s * 10^{15}$ (kg*m ³ /kPa*mol ²)
0,0	-26805,11	± 559,78	4360,95	± 843,52
0,2	-24139,16	± 209,78	3177,68	± 317,35
0,4	-21945,23	± 244,33	2657,29	± 369,12
0,6	-20068,65	± 245,14	2255,08	± 369,77
0,8	-19242,12	± 71,72	3100,83	± 97,78
1,0	-17413,38	± 418,52	2555,47	± 636,13

$T = 293,15$ K				
m (KCl) (mol/kg)	$K_\phi^0 * 10^{15}$ (m ³ /kPa*mol)	Error de $K_\phi^0 * 10^{15}$ (m ³ /kPa*mol)	$X_s * 10^{15}$ (kg*m ³ /kPa*mol ²)	Error de $X_s * 10^{15}$ (kg*m ³ /kPa*mol ²)
0,0	-28894,14	± 469,51	4851,52	± 707,50
0,2	-26267,36	± 208,97	3706,45	± 316,13
0,4	-23712,12	± 286,02	2940,21	± 432,10
0,6	-21568,01	± 299,96	2400,24	± 452,46
0,8	-20331,53	± 169,75	2876,49	± 231,43
1,0	-19120,88	± 512,04	2961,13	± 632,82

$T = 288,15$ K				
m (KCl) (mol/kg)	$K_\phi^0 * 10^{15}$ (m ³ /kPa*mol)	Error de $K_\phi^0 * 10^{15}$ (m ³ /kPa*mol)	$X_s * 10^{15}$ (kg*m ³ /kPa*mol ²)	Error de $X_s * 10^{15}$ (kg*m ³ /kPa*mol ²)
0,0	-31375,79	± 509,08	5172,87	± 767,13
0,2	-28503,9	± 268,04	4011,30	± 405,48
0,4	-25896,24	± 429,32	3213,83	± 648,59
0,6	-23524,85	± 277,84	2719,37	± 419,09
0,8	-22318,75	± 133,59	3474,91	± 182,13
1,0	-20588,83	± 861,33	2299,23	± 1182,07

Los valores a dilución infinita de la compresibilidad adiabática molar aparente como se puede observar en la Tabla 5 también son negativos para todo el rango de concentraciones de glicina y cloruro de potasio. Estos valores aumentan (es decir, se hacen menos negativos) al aumentar la concentración del electrolito, KCl.

Que K_ϕ y K_ϕ^0 sean negativos quiere decir que las moléculas de disolvente que se encuentran rodeando a las moléculas de glicina son menos compresibles que las que están en el seno de la disolución.

El efecto de las distintas molalidades de electrolito, KCl, se muestra en las interacciones entre los iones grupos amino y carbonilo con carga de la glicina, siendo estas mayores cuanto mayor

es la molalidad del electrolito. Así pues, las interacciones electrostáticas entre el agua y la glicina decrecen, ya que se neutralizan las cargas de una mayor cantidad de moléculas de glicina, lo que se traduce en una disminución de la electrostricción.

La temperatura también influye en los valores de estos dos parámetros, K_ϕ y K_ϕ^0 , de tal forma que al aumentar la temperatura también lo hacen los valores de ambos (se hacen menos negativos). Esto se traduce en una disminución de las interacciones entre la glicina y el disolvente.

El otro parámetro estudiado, la pendiente X_s , se trata de un valor ahora positivo, como se puede observar en la Tabla 5, el cual disminuye al aumentar la molalidad de cloruro de potasio o la temperatura, lo que indica que las interacciones soluto-soluto disminuyen.

4.7. Compresibilidad adiabática molar parcial de transferencia a dilución infinita, ΔK_ϕ^0 .

Se toma como referencia una expresión análoga a la utilizada en el cálculo del volumen molar aparente pero con los datos de las compresibilidades:¹⁹

$$\Delta K_\phi^0 = K_\phi^0 \text{ (en disolución acuosa de KCl)} - K_\phi^0 \text{ (en agua)} \quad (7)$$

Tabla 6: Compresibilidad adiabática molar parcial de transferencia a dilución infinita, a $T = 298,15$ K, $T = 293,15$ K y $T = 288,15$ K, a presión atmosférica, para las distintas concentraciones de cloruro de potasio.

Molalidad KCl (mol/kg)	$\Delta K_\phi^0 * 10^{15} \text{ (m}^3/\text{kPa} \cdot \text{mol)}$		
	$T = 298,15$ K	$T = 293,15$ K	$T = 288,15$ K
0,2	2665,95	2626,78	2871,89
0,4	4859,88	5182,02	5479,55
0,6	6736,46	7326,13	7850,94
0,8	7562,99	8562,61	9057,04
1,0	9391,73	9773,26	10786,96

Los valores de ΔK_ϕ^0 son todos positivos como se muestra en la tabla 6. Estos valores aumentan con la concentración del electrolito, KCl, y aumentan también al disminuir la temperatura. Dicha situación es coherente con lo mencionado en los apartados anteriores.

4.8. Coeficientes de interacción soluto-disolvente.

Los últimos parámetros de estudio en este trabajo son los coeficientes de interacción soluto-disolvente.

Para calcularlos se utiliza la teoría propuesta por Mcmillan y Mayer¹³ extendida por Friedman y Krishnan gracias a la cual se consigue separar los efectos debidos a las interacciones entre pares glicina-KCl y tríos glicina-KCl-KCl. Se expresan, a dilución infinita, el volumen molar parcial de transferencia y la compresibilidad adiabática molar parcial de transferencia calculados con anterioridad de la siguiente forma:

$$\Delta V_{\phi}^o = 2V_{AB}m_B + 3V_{ABB}m_B^2 + \dots \quad (8)$$

$$\Delta K_{\phi}^o = 2K_{AB}m_B + 3K_{ABB}m_B^2 + \dots \quad (9)$$

donde A se refiere a la glicina, B al cloruro de potasio, m_B a la molalidad del electrolito y V_{AB} , V_{ABB} , K_{AB} y K_{ABB} son los coeficientes de doble y triple interacción para el volumen y la compresibilidad adiabática respectivamente.

Se procede ahora a la realización de un ajuste a un polinomio de segundo grado pero que no contiene término independiente para conseguir así la obtención de los parámetros anteriormente citados. Las representaciones se observan en las figuras 4 y 5 y la Tabla 7.

Figura 4: Representación del volumen molar parcial de transferencia a dilución infinita ΔV_{ϕ}^o frente a la molalidad de KCl a $T = 298,15$ K, $T = 293,15$ K y $T = 288,15$ K. La función obtenida se ajusta a la ecuación (8).

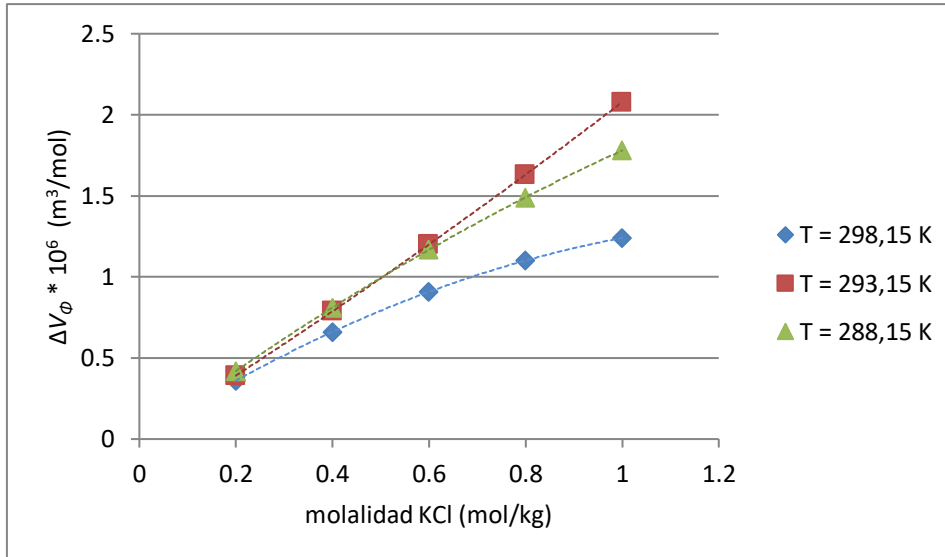
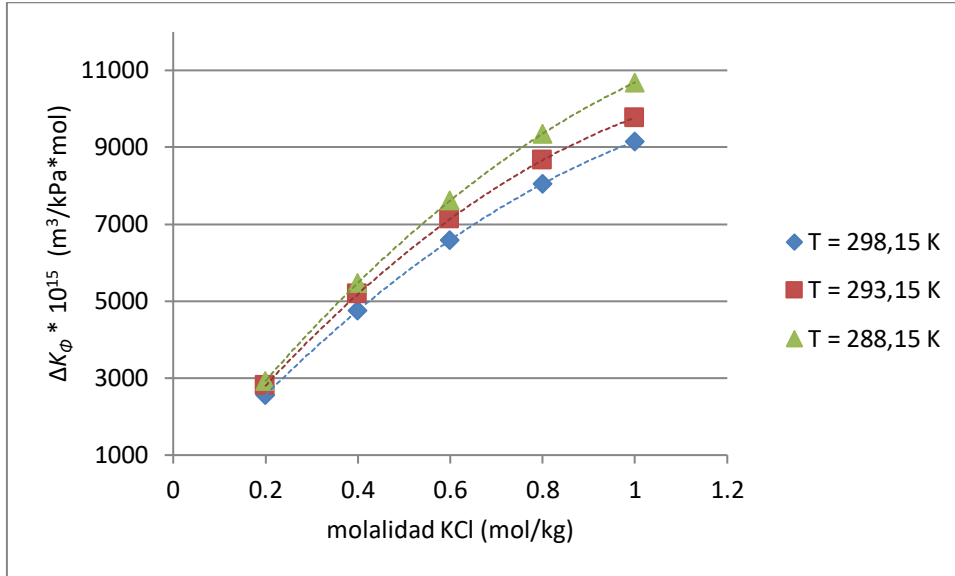


Figura 5: Representación la compresibilidad adiabática molar parcial de transferencia a dilución infinita, ΔK_{ϕ}° , frente a la molalidad de KCl a $T = 298,15$ K, $T = 293,15$ K y $T = 288,15$ K. La función obtenida se ajusta a la ecuación (9).



Una vez realizado el ajuste polinómico se obtienen los parámetros buscados: V_{AB} , V_{ABB} , K_{AB} y K_{ABB} .

Tabla 7: Coeficientes de doble y triple interacción para el volumen y la compresibilidad adiabática a $T = 298,15$ K, $T = 293,15$ K y $T = 288,15$ K

$T = 298,15$ K				
	$V_{AB} \cdot 10^6$ (m³*kg/mol²)	$V_{ABB} \cdot 10^6$ (m³*kg²/mol³)	$K_{AB} \cdot 10^6$ (m³*kg/GPa*mol²)	$K_{ABB} \cdot 10^6$ (m³*kg²/GPa*mol³)
Coeficientes	0,969	-0,234	6855,18	-1518,67
Error coeficientes	± 0,118	± 0,093	± 464,59	± 367,06

$T = 293,15$ K				
	$V_{AB} \cdot 10^6$ (m³*kg/mol²)	$V_{ABB} \cdot 10^6$ (m³*kg²/mol³)	$K_{AB} \cdot 10^6$ (m³*kg/GPa*mol²)	$K_{ABB} \cdot 10^6$ (m³*kg²/GPa*mol³)
Coeficientes	0,945	0,06	7543,41	-1772,92
Error coeficientes	± 0,289	± 0,23	± 222,09	± 175,47

$T = 288,15 \text{ K}$				
	$V_{AB} * 10^6$ ($\text{m}^3 \cdot \text{kg} / \text{mol}^2$)	$V_{ABB} * 10^6$ ($\text{m}^3 \cdot \text{kg}^2 / \text{mol}^3$)	$K_{AB} * 10^6$ ($\text{m}^3 \cdot \text{kg} / \text{GPa} \cdot \text{mol}^2$)	$K_{ABB} * 10^6$ ($\text{m}^3 \cdot \text{kg}^2 / \text{GPa} \cdot \text{mol}^3$)
Coeficientes	1,101	-0,142	7849,66	-1672,07
Error coeficientes	$\pm 0,236$	$\pm 0,186$	$\pm 315,22$	$\pm 249,05$

Los coeficientes de doble interacción, tanto para el volumen como para la compresibilidad adiabática, son positivos y en todos los casos mucho mayores que los respectivos coeficientes de triple interacción, tanto por su signo (los coeficientes de triple interacción son negativos) como en valor absoluto. Esto indica que las interacciones que predominan son las glicina-KCl frente a las glicina-KCl-KCl. Esto es concordante con la estructura de zwitterion de la glicina.

En el caso del volumen el coeficiente de triple interacción no es negativo a $T = 293,15 \text{ K}$ mientras que en el caso de la compresibilidad adiabática el coeficiente de interacción es negativo para las tres temperaturas estudiadas. Esto es debido a errores experimentales, como se puede observar el valor del error en V_{ABB} a $293,15 \text{ K}$ (en valor absoluto) es mayor que el del propio coeficiente.

El efecto de la temperatura no se refleja bien con los datos que manejamos en este trabajo ya que no se observa una tendencia claramente ascendente/descendente con esta variable.

5. Conclusiones

Una vez realizadas las medidas tal y como se describe en el protocolo descrito y calculado los parámetros necesarios para obtener información sobre las interacciones soluto-soluto y soluto-disolvente (la cual es de gran importancia en diversos campos como el de la bioquímica) se obtuvieron las conclusiones que se resumen a continuación.

En cuanto a la temperatura se observa que un aumento de esta provoca que se debiliten las interacciones entre el soluto y el disolvente.

Los valores positivos del volumen molar aparente y negativos de la compresibilidad adiabática molar aparente indican que existen interacciones entre el soluto y el disolvente.

En cuanto a estas mismas propiedades pero a dilución infinita, igual que antes, los valores del volumen son positivos mientras que los de la compresibilidad son negativos. Estos datos nos indican la menor compresibilidad de las moléculas de disolvente que se encuentran rodeando a la glicina frente a las que se encuentran en el seno de la disolución. Al representar ambos valores frente a la concentración de glicina se obtuvieron pendientes positivas, por lo que se puede afirmar que las interacciones soluto-soluto son más débiles que las soluto-disolvente.

Las interacciones electrostáticas que se dan entre los iones del electrolito, K^+ y Cl^- , y los grupos cargados de la glicina, COO^- y NH_3^+ , son las que determinan la influencia del electrolito. Estas interacciones son las responsables de que la electrostricción de las moléculas de disolvente disminuya y cause que el volumen de contracción también disminuya. Otra consecuencia es que las moléculas de agua sean más compresibles. Todo esto concuerda con que las propiedades que se estudian a lo largo de este trabajo aumenten con la concentración de cloruro de potasio.

Por último se calcularon los coeficientes de interacción entre pares glicina-KCl y y trios glicina-KCl-KCl aplicando la teoría de McMiller y Mayer extendida por Friedman y Krishnan. Con estos resultados se concluye que las interacciones que predominan son las glicina-KCl.

6. Bibliografía

- [1] Meireles Ribeiro, A. J. Proteína. Revista de *Ciência Elementar*, **2014**, 2(3).
- [2] Gil Soriano, C., Gómez de Salazar García Galiano, J.M. y Pedrinaci Rodríguez, E. *Biología y Geología*; SM (CESMA): España, **2011**; pp 10-16.
- [3] Ontivieros Nuñez, PL. Universidad Autónoma del Carmen. *Conceptos básicos de bioquímica*. 2010
- [4] Lozano Teruel, J.A., Galindo, J.D., García-Borrón, J.C., Martínez-Liarte, J.H., Peñafiel R. y Solano F., *Bioquímica y biología molecular para ciencias de la salud*, 3ª. McGraw Hill. [En línea]. Disponible en: <https://www.um.es/lafem/DivulgacionCientifica/Libros/BioquimicaYBiologiaMolecularParaCienciasDeLaSalud.pdf>
- [5] Riyazuddeen I.K. Effect of temperatura on volumetric and isentropic compressibility og glycine in aqueous KCl/NaCl solutions. *Journal of Molecular Liquids*. **2010**, 152 , 57-62.
- [6] Krakowiak, H., Wawer, J. & Panuszko, A. The hydration of the protein stabilizing agents: Trimethylamine-N-oxide, glycine and its N-methyl derivatives – The volumetric and compressibility studies. *Journal of Chemical Thermodynamics*. **2013**, 60, 179-190.
- [7] Murray, Robert K, Bender, David A., Bothan, Kaathlean M., Kennelly, Peter J., Rodwell, Victor W. y Weil, P. Anthony. *Harpers illustrated biochemistry mc graw hill*
- [8] <file:///C:/Users/equipo/Downloads/03.%20El%20agua%20en%20bioqu%C3%ADmica%20y%20fisiolog%C3%ADa%20del%20autor%20Ana%20M.%20Fuentes%20y%20Carlos%20F.%20Am%C3%A1bile-Cuevas.pdf> (Consultado Junio 2022)

- [9] Badarayani, R. y Kumar, A. (2004). The mixing effect of glycylglycine with KCl, KBr and Na₂SO₄ from volumetric and viscometric investigations at 291,15K. *Journal of Solution Chemistry*. **2004**, vol. 33(4), 407-426.
- [10] Fernández, G. (2010). *Propiedades termodinámicas, variables termodinámicas o funciones de estado*. <https://www.quimicafisica.com/node/35>. (Consultado Junio 2022)
- [11] S. R: Matus, Ingeniería en física aplicada, p. 131
- [12] Maria Belén Álvarez, I., Judith Santa Cruz Corregido por, I., Roxana Martinet, I., & Analía Frutos, I. (2016). Trabajo Práctico N°2: Propiedades molares parciales. Retrieved from: https://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/quimica/3_anio/fisicoquimica/files/TP%20PROPiedades%20MOLARES%20PARCIALES.pdf
- [13] W.G. McMillan Jr., J.E. Mayer. The statistical thermodynamics of multicomponent systems, *J. Chem. Phys.* 13 (1945) 276-303
- [14] H.L. Friedman, C.V. Kirshnan. Enthalpies of alkyl sulfonates in water, heavy water, and water-alcohol mixtures and interaction of water with methylene groups, *J. Solut Chem.* 2 (1973) 37-51.
- [15] Spieweck, F & Bettin, H.: Review: Solid and liquid density determination. *Tecnisches Messen*. **1992**, 59, 285-292
- [16] Landolt-Börnstein: Neue Serie, Band 5 ; Molekularakustik Temperaturskala von 1990 PTB-Mitt 100 (**1990**), pp 195-196
- [17] Soto, A., Arce, A. y Khoshkbarchi, M.K. Effect of cation and anion of an electrolyte on apparent molar volume, isentropic compressibility and refractive index of glycine in aqueous solutions. *Biophysical Chemistry*. **1999**, 76, 73-82.
- [18] J.-L. Shen, Z.-F. Li, B.-H. Wang y Y.-M. Zhang, Partial molar volumes of some amino acids and a peptide in water, DMSO, NaCl, and DMSO/NaCl aqueous solutions, *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 32(6), 805-819, jun. **2000**
- [19] Kumar, H. y Kaur, K. Interaction of antibacterial drug ampicillin with glycine and its peptides analyzed by volumetric and acoustic methods at different temperatures, *Thermochimica Acta*. **2013**, 551, 40-45.

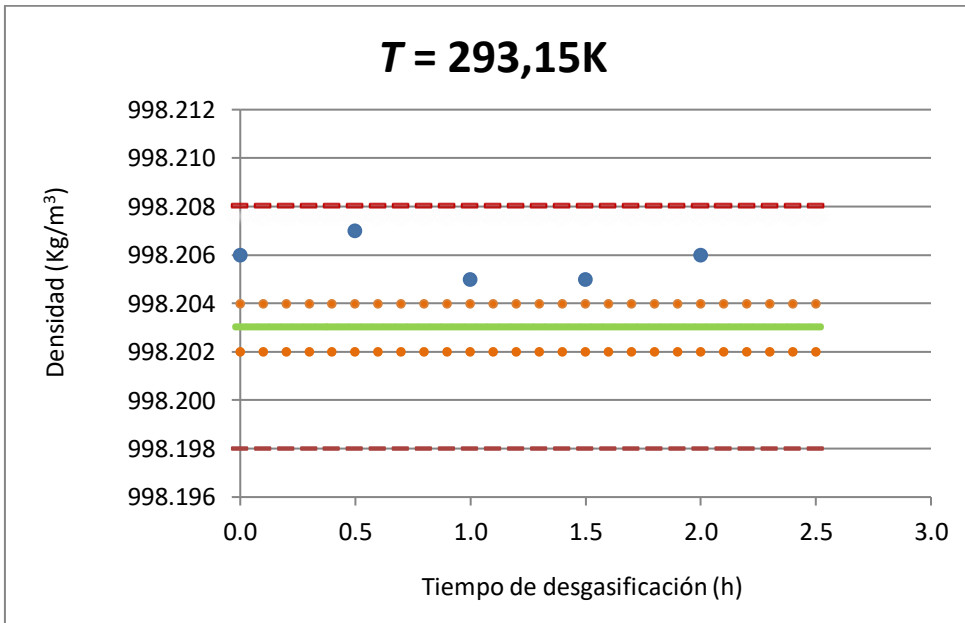
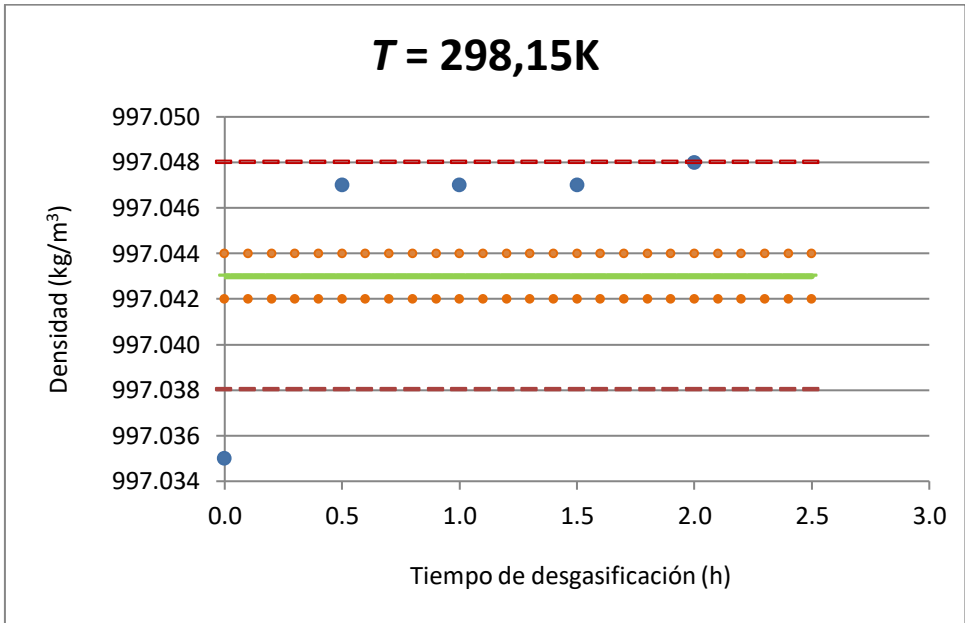
ANEXO

Tabla A1: Densidad del agua mili-Q a diferentes tiempos de desgasificación medida a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

	$T=298,15\text{K}$	$T=293,15\text{K}$	$T=288,15\text{K}$
Tiempo (h)	Densidad (kg/m^3)		
0,0	997,035	998,206	999,099
0,5	997,047	998,207	999,099
1,0	997,047	998,205	999,098
1,5	997,047	998,205	999,098
2,0	997,048	998,206	999,099
Referencia ¹⁵	997,043	998,203	999,099

Figura A1: Densidad del agua mili-Q a diferentes tiempos de desgasificación medida a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

(- - -) Rango de precisión del aparato; (. . .) Rango de reproducibilidad del aparato;
(---) Valor de referencia



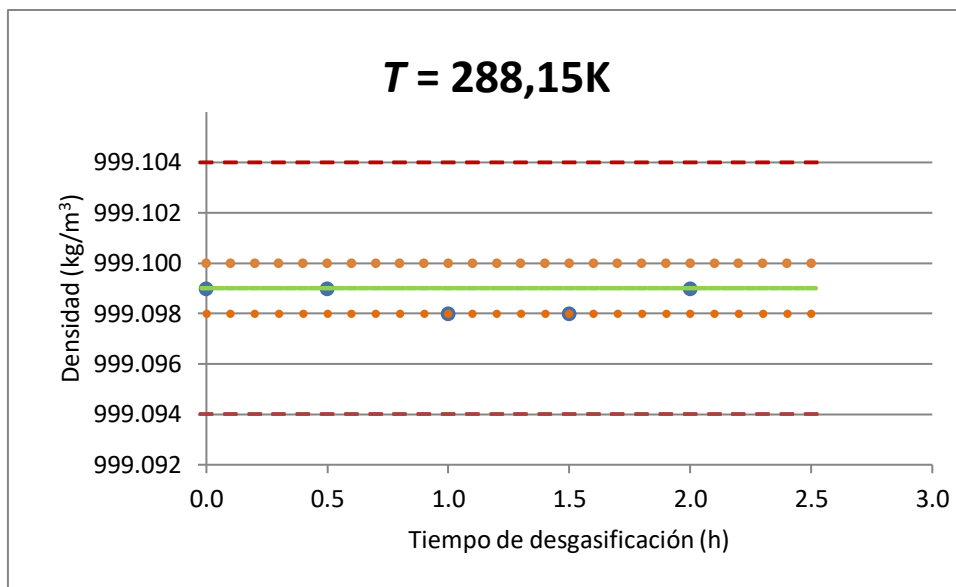
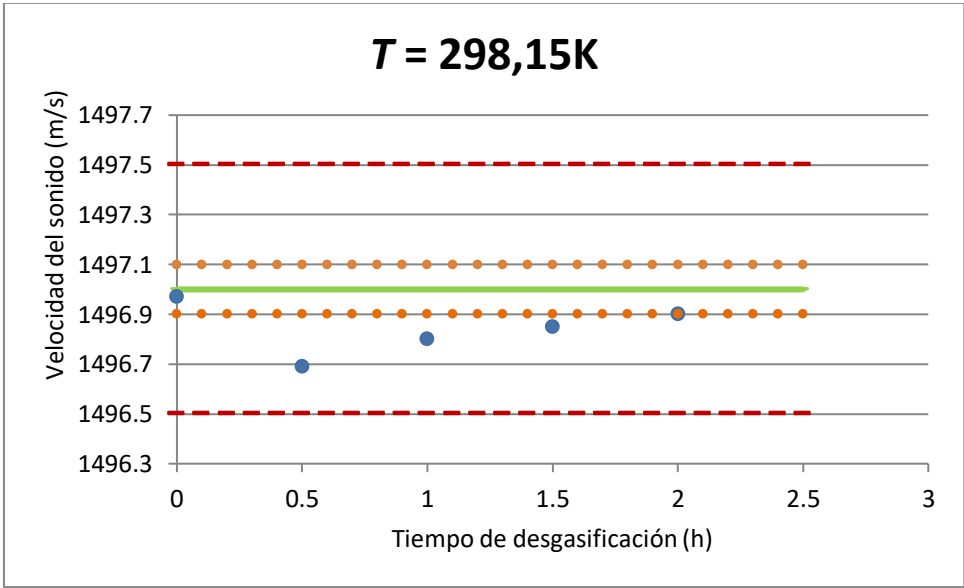


Tabla A2: Velocidad del sonido del agua mili-Q a diferentes tiempos de desgasificación medida a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

	$T=298,15\text{ K}$	$T=293,15\text{ K}$	$T=288,15\text{ K}$
Tiempo (h)	Velocidad del sonido (m/s)		
0,0	1496,97	1482,57	1466,29
0,5	1496,69	1482,70	1466,43
1,0	1496,80	1482,69	1466,46
1,5	1496,85	1482,74	1466,48
2,0	1496,90	1482,79	1466,59
Referencia ¹⁶	1497,00	1482,66	1466,25

Figura A2: Velocidad del sonido del agua mili-Q a diferentes tiempos de desgasificación medida a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

(- - -) Rango de precisión del aparato; (. . .) Rango de reproducibilidad del aparato;
 (---) Valor de referencia



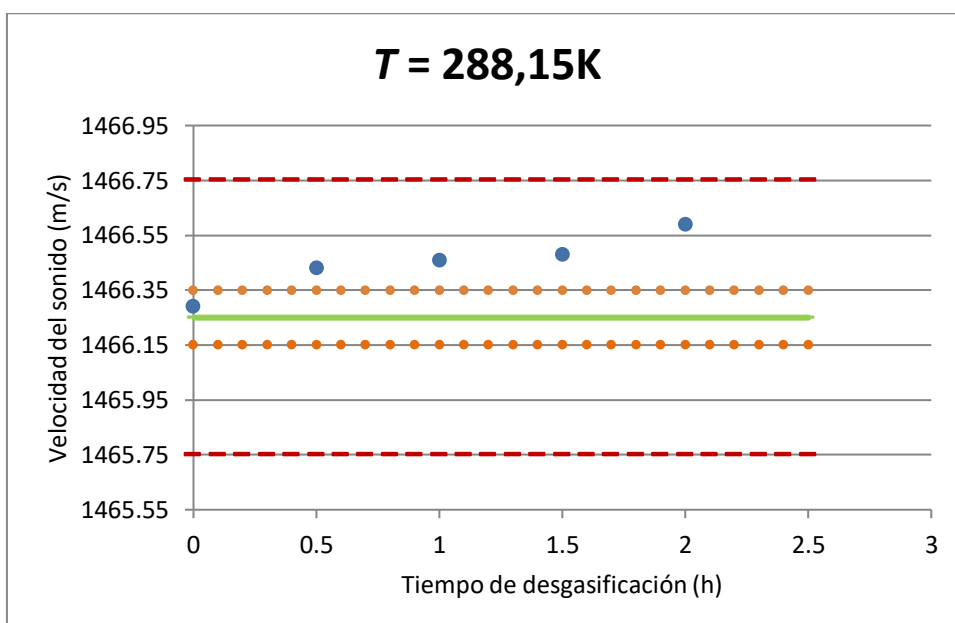
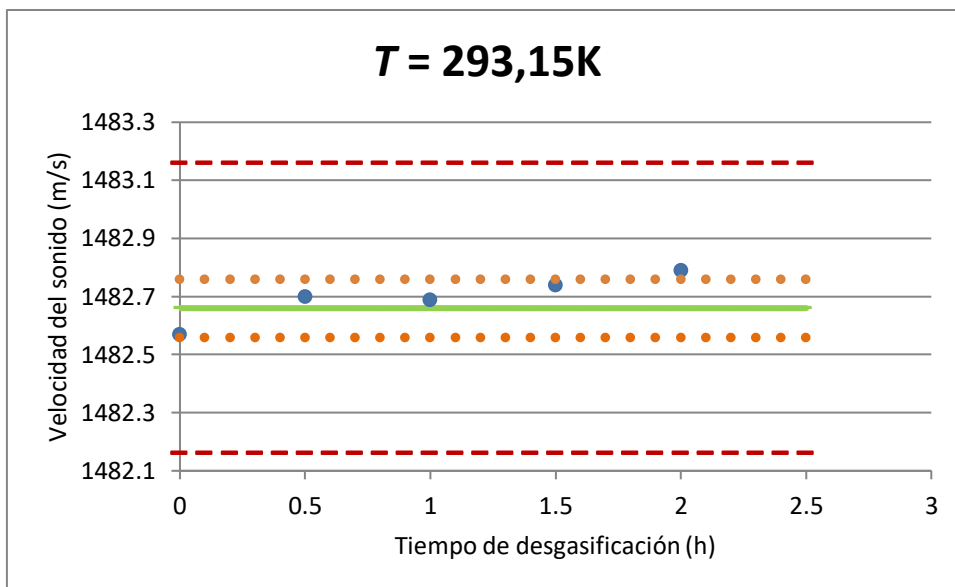
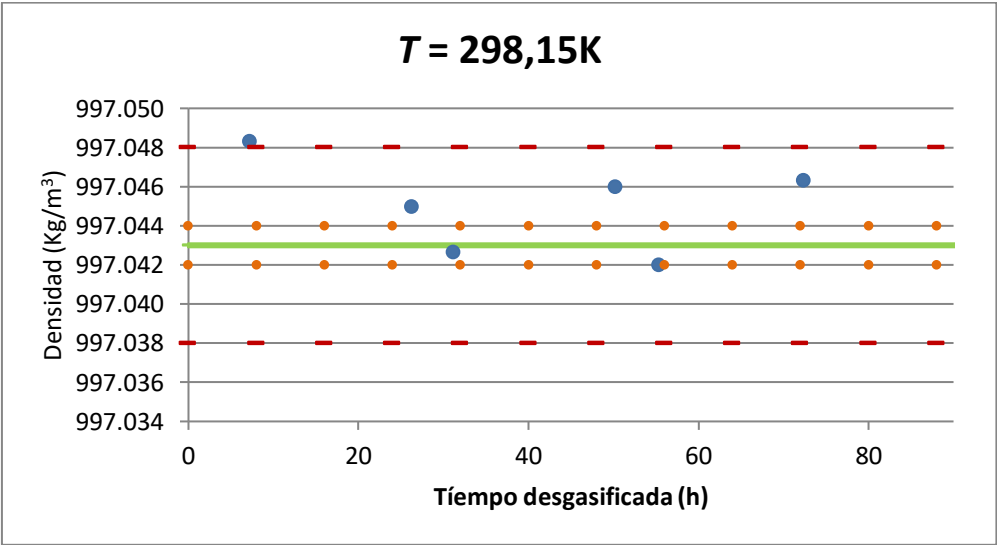


Tabla A3: Densidad del agua mili-Q a diferentes tiempos medida a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

	$T=298,15\text{ K}$	$T=293,15\text{ K}$	$T=288,15\text{ K}$
Tiempo desgasificada (h)	Densidad (kg/m³)		
7,17	997,048	998,205	999,098
26,27	997,045	998,199	999,098
31,13	997,043	998,200	999,097
50,17	997,046	998,205	999,098
55,33	997,042	998,200	999,086
72,33	997,046	998,204	999,098
Referencia ¹⁵	997,043	998,203	999,099

Figura A3: Densidad del agua mili-Q a diferentes tiempos medida a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

(- - -) Rango de precisión del aparato; (. . .) Rango de reproducibilidad del aparato;
 (---) Valor de referencia



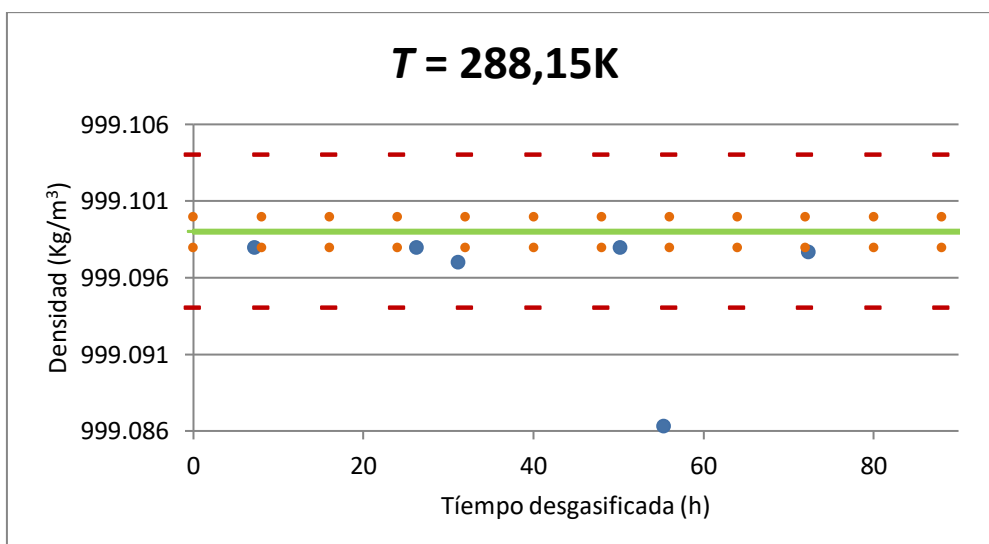
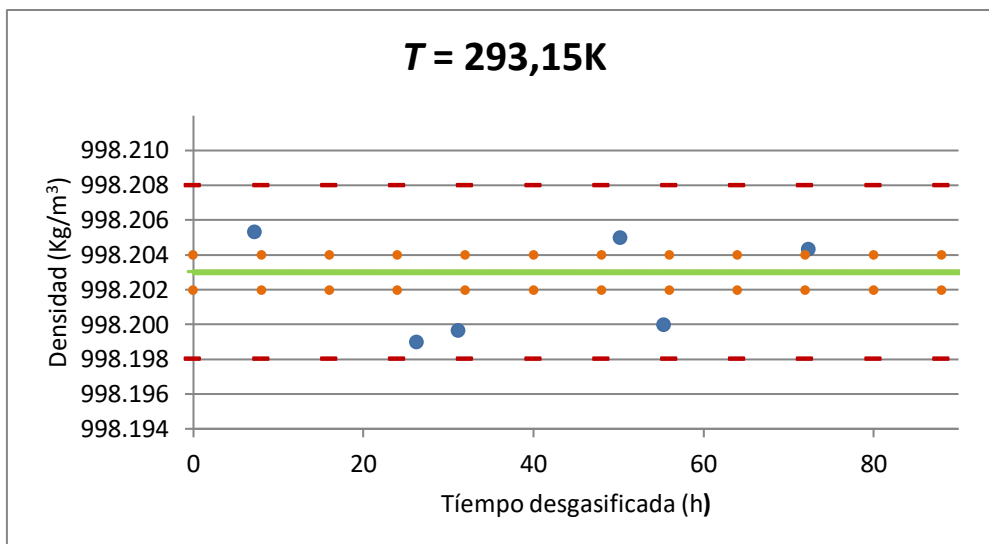
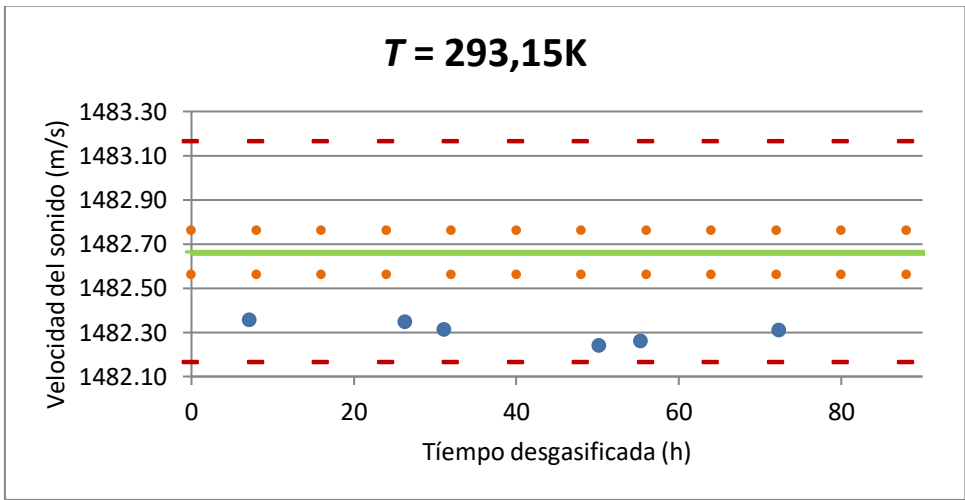
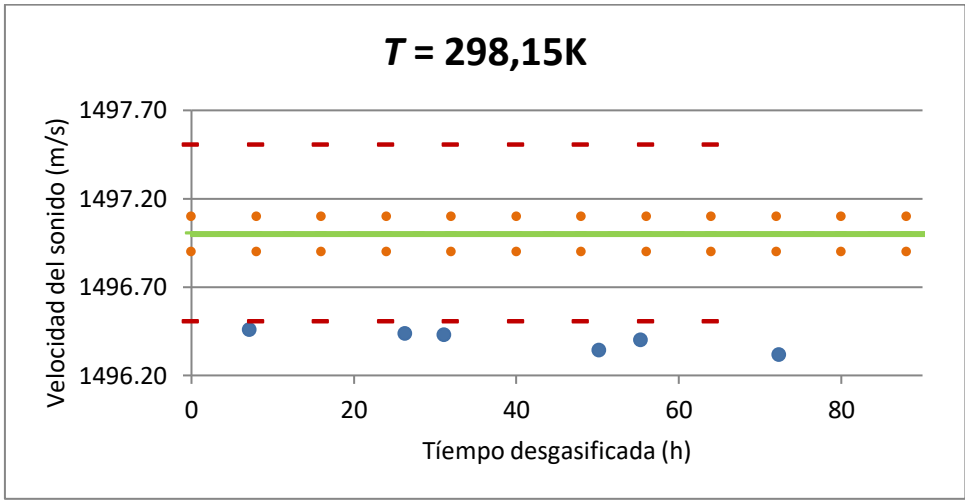


Tabla A4: Velocidad del sonido del agua mili-Q a diferentes tiempos medida a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

	$T=298,15\text{ K}$	$T=293,15\text{ K}$	$T=288,15\text{ K}$
Tiempo desgasificada (h)	Velocidad del sonido (m/s)		
7,17	1496,46	1482,36	1466,03
26,27	1496,44	1482,35	1466,08
31,13	1496,43	1482,31	1466,07
50,17	1496,34	1482,24	1465,96
55,33	1496,40	1482,26	1465,96
72,33	1496,32	1482,31	1465,94
Referencia ¹⁶	1497,00	1482,66	1466,25

Figura A4: Velocidad del sonido del agua mili-Q a diferentes tiempos medida a $T = 298,15\text{ K}$, $T = 293,15\text{ K}$ y $T = 288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

(- - -) Rango de precisión del aparato; (. . .) Rango de reproducibilidad del aparato;
(---) Valor de referencia



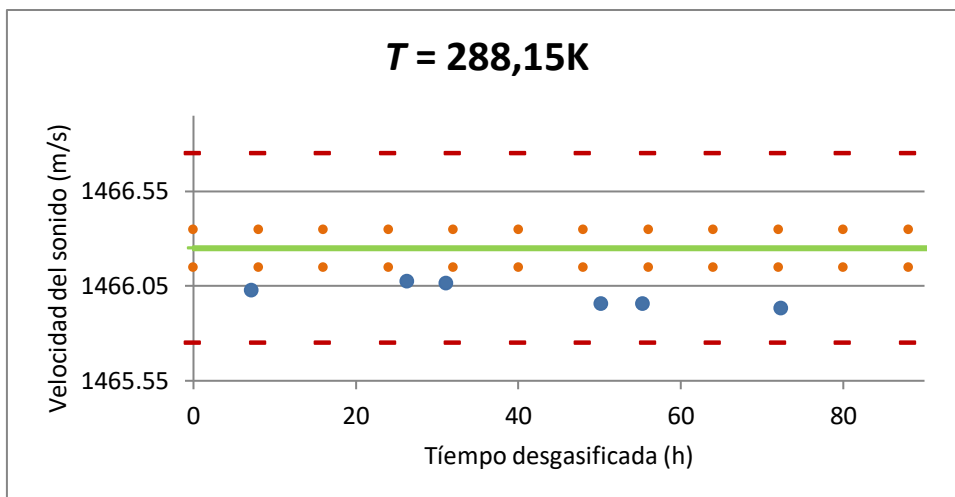


Tabla A5: Densidad y velocidad del sonido de disoluciones acuosas de glicina a diferentes concentraciones a $T=298,15\text{ K}$, $T=293,15\text{ K}$ y $T=288,15\text{ K}$ a presión atmosférica

	$T = 298,15\text{ K}$		$T = 293,15\text{ K}$		$T = 288,15\text{ K}$	
Molalidad glicina (mol/kg)	Densidad (kg/m^3)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m^3)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m^3)	Velocidad del sonido (m/s)
0,0000	997,043	1496,57	998,205	1482,44	999,096	1466,19
0,2001	1003,334	1507,04	1004,563	1493,22	1005,542	1477,32
0,4000	1009,403	1517,64	1010,696	1504,12	1011,751	1488,62
0,5997	1015,267	1526,71	1016,614	1513,56	1017,750	1498,37
0,7999	1021,026	1536,39	1022,432	1523,58	1023,622	1508,77
1,0012	1026,818	1546,71	1028,277	1533,65	1029,533	1519,22

Tabla A6: Densidad y velocidad del sonido de disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 0,2 mol/kg como disolvente a $T=298,15\text{ K}$, $T=293,15\text{ K}$ y $T=288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

	$T = 298,15\text{ K}$		$T = 293,15\text{ K}$		$T = 288,15\text{ K}$	
Molalidad glicina (mol/kg)	Densidad (kg/m^3)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m^3)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m^3)	Velocidad del sonido (m/s)
0,0000	1006,356	1507,14	1007,603	1493,44	1008,593	1477,72
0,1999	1012,508	1517,33	1013,815	1504,03	1014,890	1488,63
0,3993	1018,541	1527,52	1019,906	1514,57	1021,053	1499,57
0,5879	1024,093	1536,88	1025,513	1524,21	1026,723	1509,53
0,8001	1030,097	1546,90	1031,566	1534,55	1032,851	1520,14
0,9998	1035,587	1556,43	1036,986	1544,43	1038,329	1530,34

Tabla A7: Densidad y velocidad del sonido de disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 0,4 mol/kg como disolvente a $T=298,15\text{ K}$, $T=293,15\text{ K}$ y $T=288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

	$T = 298,15\text{ K}$		$T = 293,15\text{ K}$		$T = 288,15\text{ K}$	
Molalidad glicina (mol/kg)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)
0,0000	1015,478	1517,63	1016,794	1504,42	1017,892	1489,18
0,1994	1021,560	1527,55	1022,883	1514,76	1024,089	1499,81
0,3988	1027,288	1537,99	1028,632	1525,58	1029,983	1511,09
0,6002	1033,242	1547,16	1034,715	1534,84	1036,029	1520,70
0,7986	1038,895	1556,89	1040,428	1544,91	1041,796	1531,27
0,9970	1044,352	1566,04	1045,939	1554,40	1047,346	1540,98

Tabla A8: Densidad y velocidad del sonido de disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 0,6 mol/kg como disolvente a $T=298,15\text{ K}$, $T=293,15\text{ K}$ y $T=288,15\text{ K}$ y a presión atmosférica.

	$T = 298,15\text{ K}$		$T = 293,15\text{ K}$		$T = 288,15\text{ K}$	
Molalidad glicina (mol/kg)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)
0,0000	1024,291	1527,36	1025,682	1514,59	1026,868	1499,84
0,2012	1030,266	1537,28	1031,720	1524,78	1032,967	1510,41
0,3999	1036,156	1547,18	1037,661	1535,05	1038,973	1520,98
0,5999	1041,777	1556,79	1043,300	1544,89	1044,693	1531,15
0,7993	1047,313	1566,00	1048,913	1554,43	1050,338	1541,06
0,9992	1052,761	1575,43	1054,401	1564,09	1055,885	1550,98

Tabla A9: Densidad y velocidad del sonido de disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 0,8 mol/kg como disolvente a T=298,15K, T=293,15K y T=288,15K y a presión atmosférica.

	T = 298,15 K		T = 293,15 K		T = 288,15 K	
Molalidad glicina (mol/kg)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)
0,0000	1033,002	1537,14	1034,467	1524,77	1035,730	1510,57
0,2096	1038,691	1547,36	1039,974	1535,47	1041,499	1521,64
0,4000	1044,711	1556,75	1046,181	1544,93	1047,674	1531,38
0,5989	1050,277	1566,13	1051,889	1554,60	1053,331	1541,33
0,7984	1055,740	1575,34	1057,396	1564,19	1058,890	1551,22
0,9979	1060,863	1584,28	1062,561	1573,37	1064,102	1560,64

Tabla A10: Densidad y velocidad del sonido de disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 1,0 mol/kg como disolvente a T=298,15K, T=293,15K y T=288,15K y a presión atmosférica.

	T = 298,15 K		T = 293,15 K		T = 288,15 K	
Molalidad glicina (mol/kg)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)	Densidad (kg/m ³)	Velocidad del sonido (m/s)
0,0000	1041,500	1547,22	1042,986	1535,263	1044,357	1520,53
0,2012	1046,794	1558,03	1047,996	1545,403	1049,564	1531,14
0,3995	1053,049	1565,95	1054,372	1554,193	1056,027	1541,13
0,5999	1058,254	1576,24	1060,089	1565,250	1061,693	1552,33
0,7775	1063,060	1584,55	1064,558	1573,800	1066,473	1561,19
0,9999	1068,674	1594,60	1070,755	1583,847	1072,471	1571,30

Figura A5: Comparación de los valores de densidad y velocidad del sonido de los datos obtenidos en este trabajo con los datos de Soto et al (1998)¹⁷ para disoluciones acuosas de glicina de diferentes concentraciones. Medidas a presión atmosférica y a T=298,15K

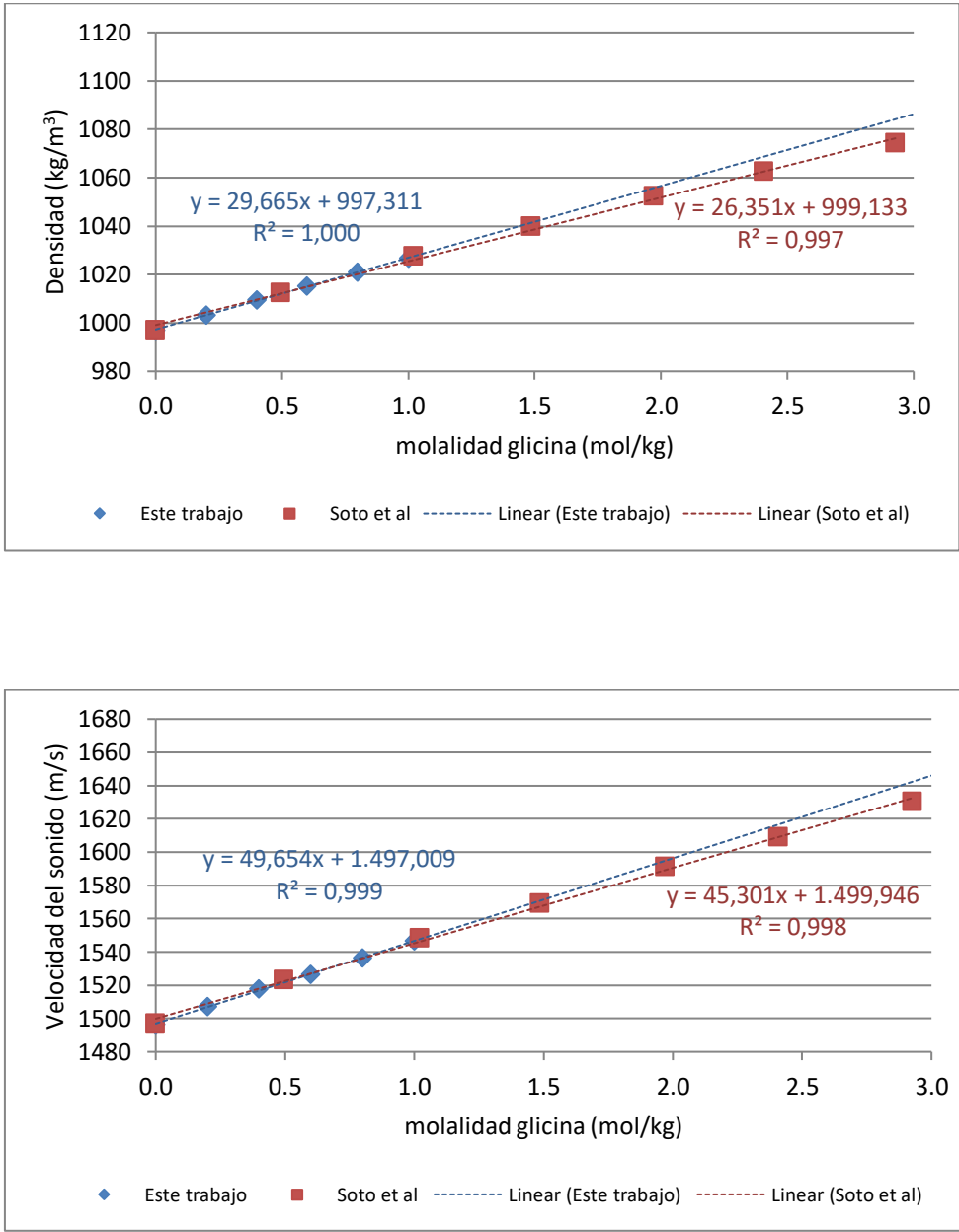


Figura A6: Comparación de los valores de densidad y velocidad del sonido de los datos obtenidos en este trabajo con los datos de Soto et al (1998)¹⁷ para disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 0,2 mol/kg. Medidas a presión atmosférica y a T=298,15K.

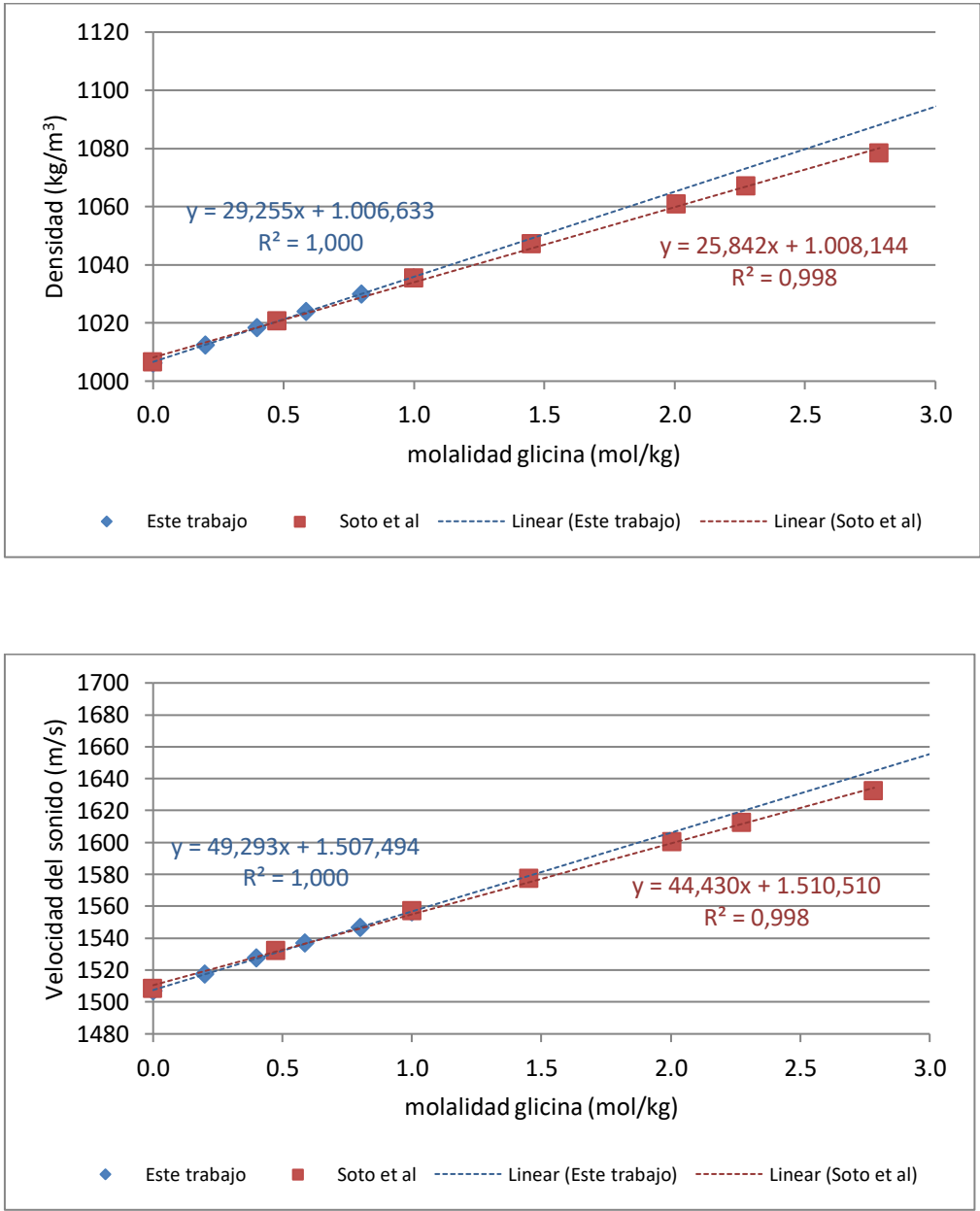


Figura A7: Comparación de los valores de densidad y velocidad del sonido de los datos obtenidos en este trabajo con los datos de Soto et al (1998)¹⁷ para disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 0,4 mol/kg. Medidas a presión atmosférica y a T=298,15K.

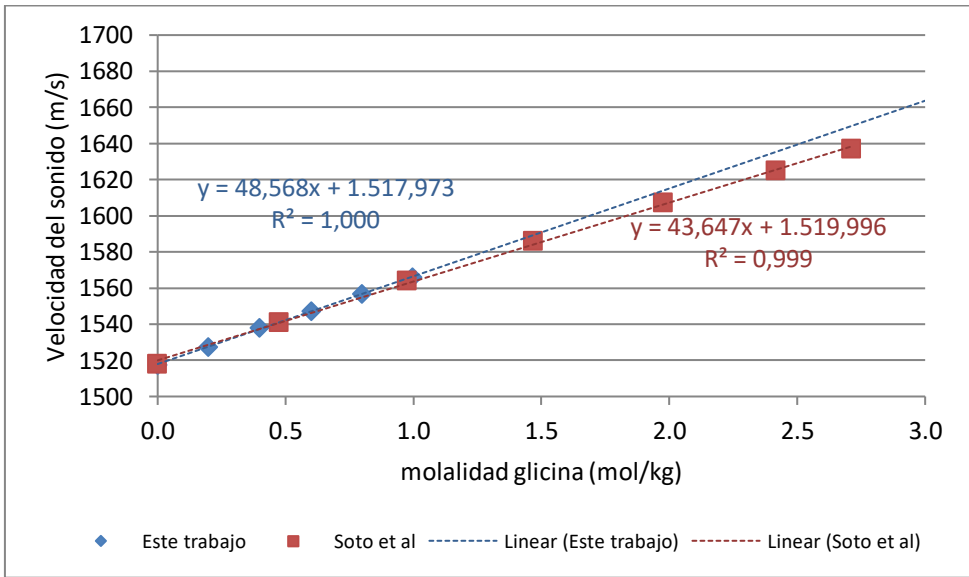
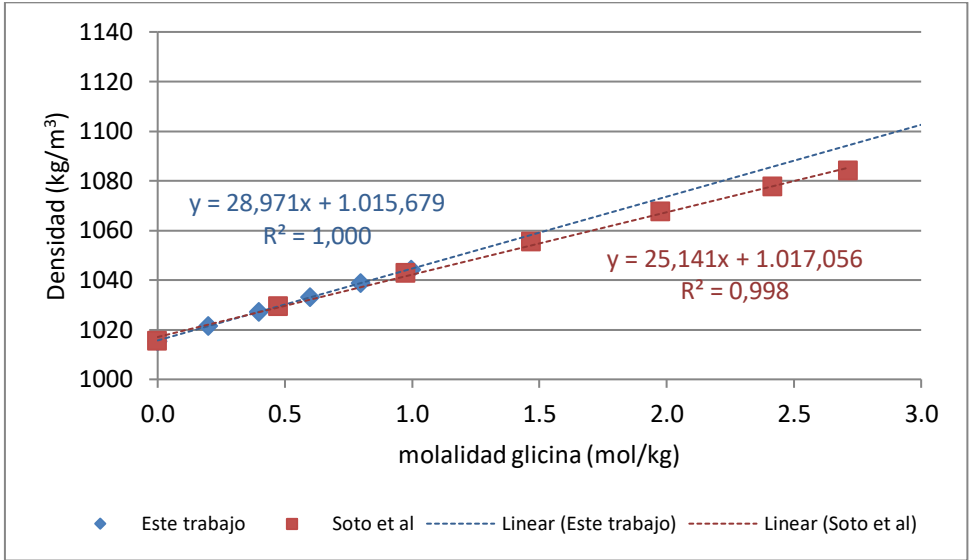


Figura A8: Comparación de los valores de densidad y velocidad del sonido de los datos obtenidos en este trabajo con los datos de Soto et al (1998)¹⁷ para disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 0,6 mol/kg. Medidas a presión atmosférica y a T=298,15K.

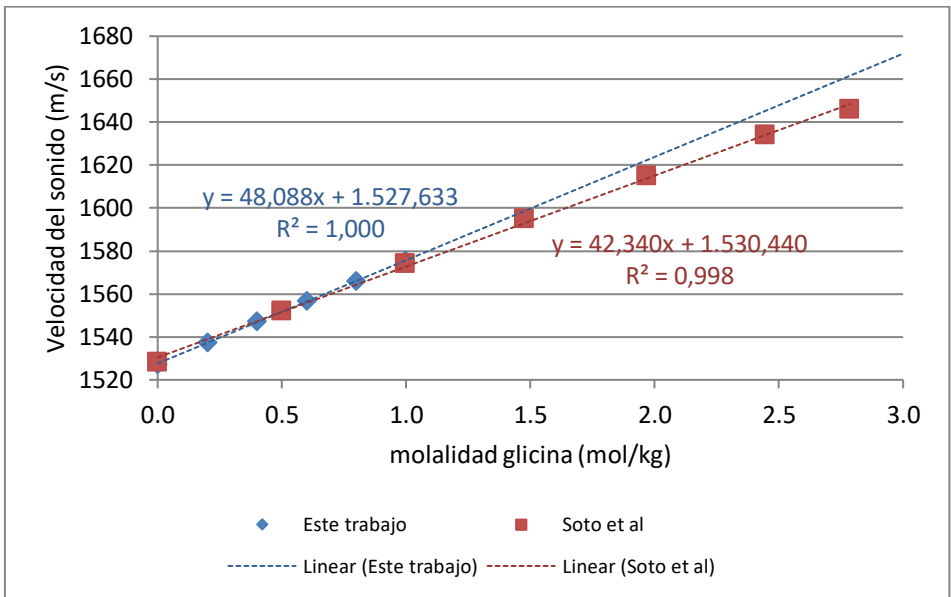
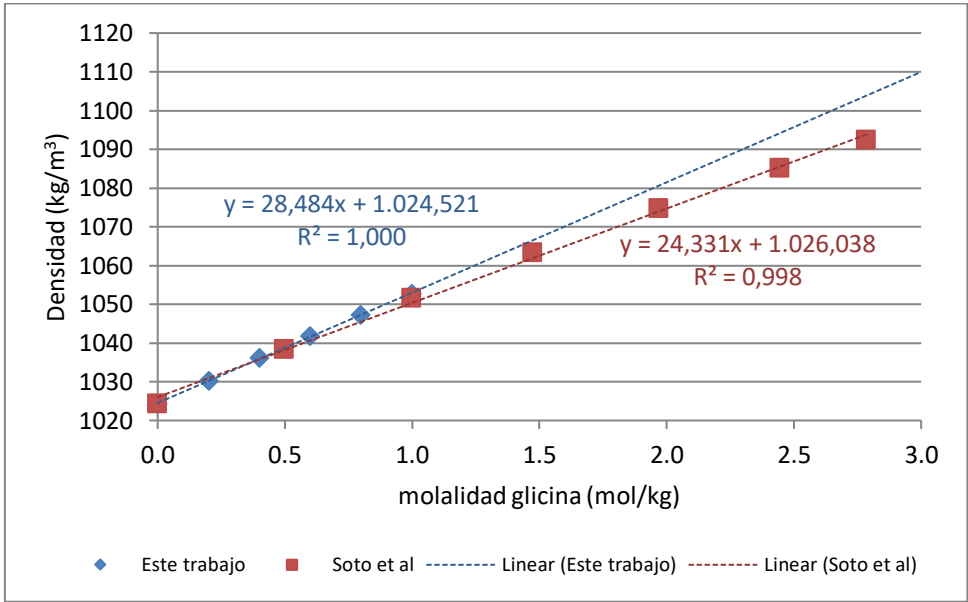


Figura A9: Comparación de los valores de densidad y velocidad del sonido de los datos obtenidos en este trabajo con los datos de Soto et al (1998)¹⁷ para disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 0,8 mol/kg. Medidas a presión atmosférica y a T=298,15K.

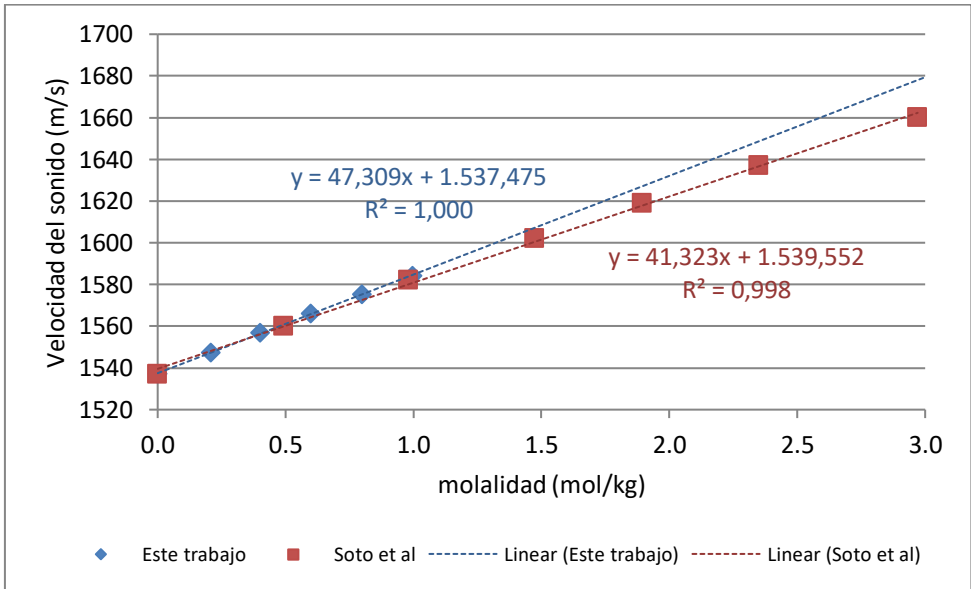
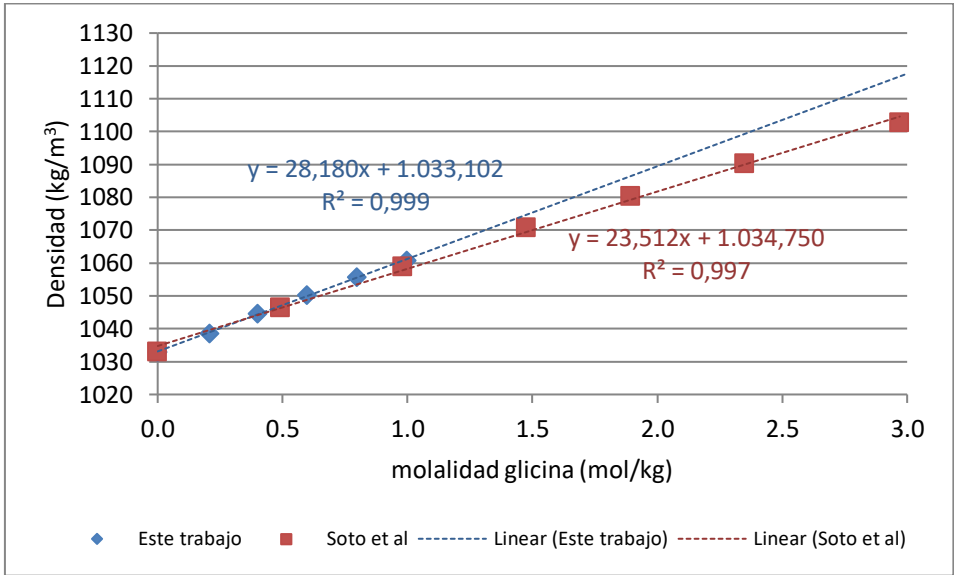


Figura A10: Comparación de los valores de densidad y velocidad del sonido de los datos obtenidos en este trabajo con los datos de Soto et al (1998)¹⁷ para disoluciones de glicina de diferentes concentraciones en disoluciones acuosas de cloruro de potasio 1,0 mol/kg. Medidas a presión atmosférica y a T=298,15K.

