



## *Simposio Internacional / International Symposium:*

### *Segundo Simposio Internacional Julio Palacios*

### *The Second Julio Palacios International Symposium*

*A Coruña, 11 y 12 de julio de 2018 / July 11 and 12, 2018*

#### **ABSTRACT**

### **Velocidades de reacción inorgánicas y catalizadas por enzimas en función de la temperatura**

Neil L. Allan  
University of Bristol

Se estudian los efectos de la temperatura de entalpías y entropías de formación sobre velocidades de reacción enzimáticas y de catálisis, así como procesos de estado sólido de materiales, utilizando la combinación de modelos simples y simulaciones. Normalmente se asume que las entalpías y entropías de formación son independientes de la temperatura, siendo esta premisa válida para muchas reacciones de moléculas pequeñas en solventes comunes. Sin embargo, aparecen en aumento variaciones complejas con la temperatura en reacciones catalizadas por enzimas, junto a valores negativos de la capacidad calorífica de activación  $\Delta C_p^\ddagger$  entre reactivos y el estado de transición.

Se examinan los factores que pueden contribuir a estos valores negativos en reacciones de catalización con o sin enzimas, poniendo particular atención al número de modos bajos de vibración de los estados térmicos accesibles y cómo estos modos cambian durante la reacción. Se observan importantes paralelismos a explorar en química inorgánica y de materiales – los cambios en el número de modos de baja frecuencia parecen contribuir a estos fenómeros singulares, como la expansión térmica negativa en un amplio rango de temperaturas y variaciones de tipo no-Arhenius en velocidades de difusión.

\*Todos los derechos de propiedad intelectual son del autor. Queda prohibida la reproducción total o parcial de la obra sin autorización expresa del autor.

© FUNDACIÓN RAMÓN ARECES. Todos los derechos reservados.

\*All intellectual property rights belong to the author. Total or partial reproduction of the work without express permission of the author is forbidden. © FUNDACIÓN RAMÓN ARECES. All rights reserved.