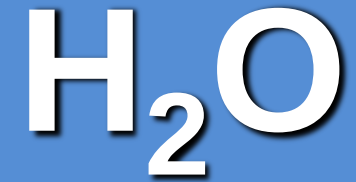


Disciplina QBQ1151: Introdução à Bioquímica
Química Noturno



Marcelo S. da Silva

21/08/2023

Água

- **Propriedades da água;**
- **Ligações de Hidrogênio;**
- **Água é uma molécula polar;**
- **Água e sistemas biológicos;**
- **Curiosidades e Discussão**

Água

- **Propriedades da água;**
- Ligações de Hidrogênio;
- Água é uma molécula polar;
- Água e sistemas biológicos;
- Curiosidades e Discussão

Água é a substância mais abundante em nossas células

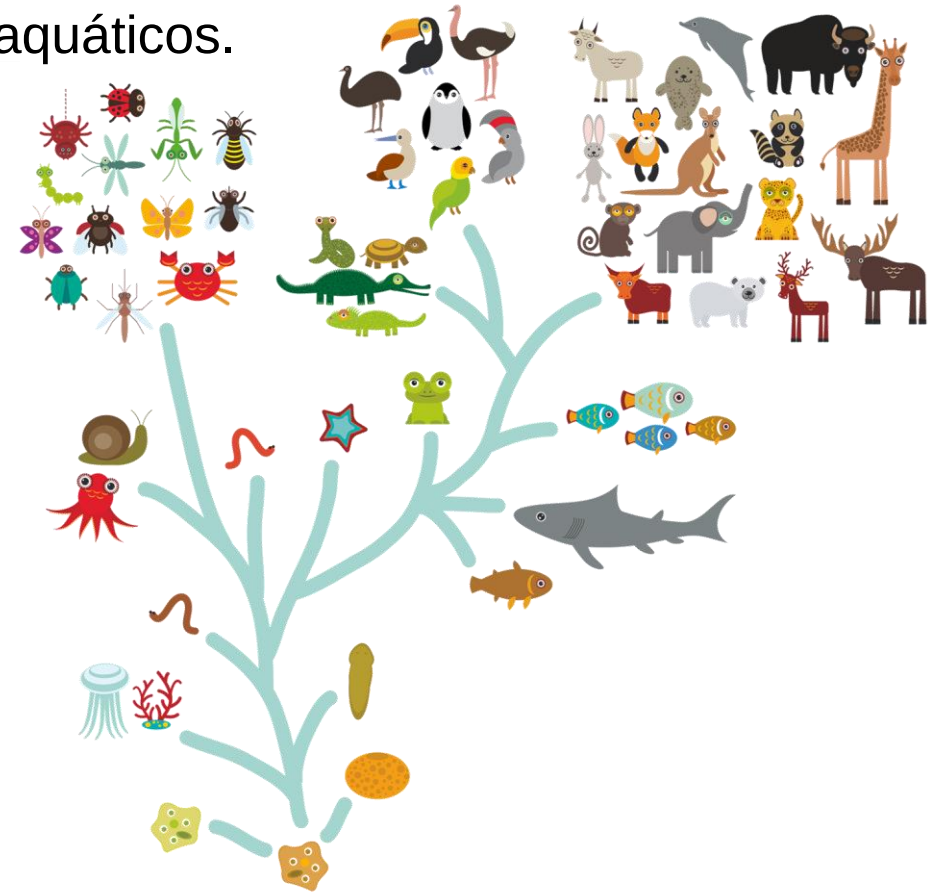
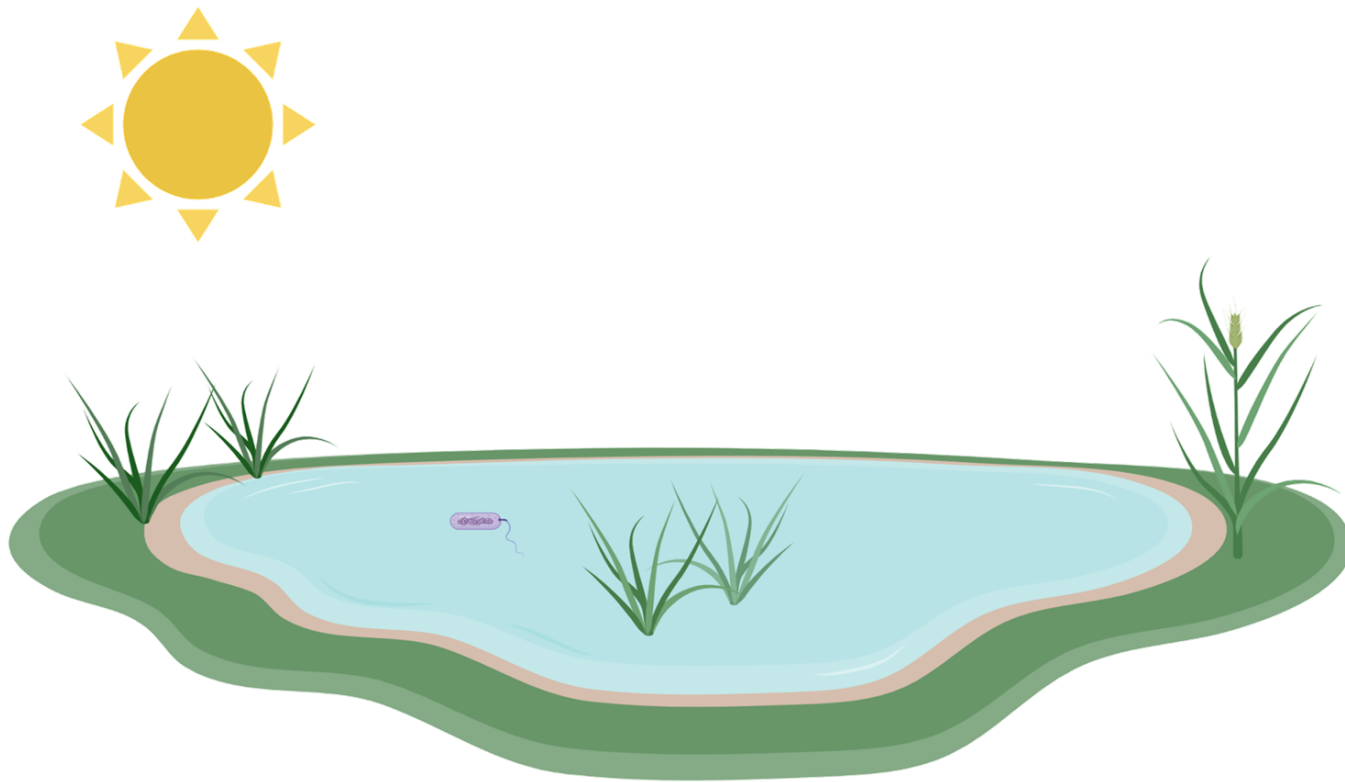
- Substância mais abundante nos sistemas vivos, constituindo mais de 70% do peso da maioria dos organismos.

TABLE 1–1		Molecular Components of an <i>E. coli</i> Cell	
	Percentage of total weight of +1cell	Approximate number of different	
Water	70	1	
Proteins	15	3,000	
Nucleic acids			
DNA	1	1	
RNA	6	>3,000	
Polysaccharides	3	5	
Lipids	2	20	
Monomeric subunits and intermediates	2	500	
Inorganic ions	1	20	

Table 1-1
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W. H. Freeman and Company

Água

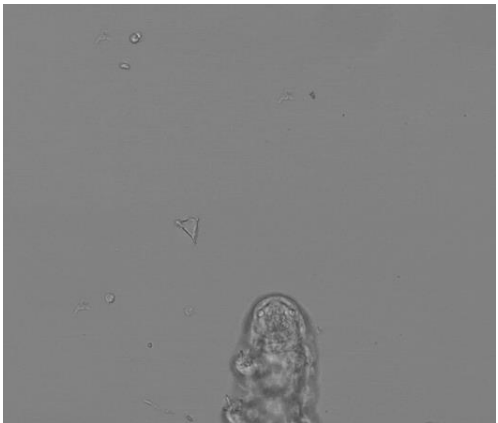
- Evolução das primeiras biomoléculas se deu provavelmente em soluções aquosas.
- 1ºs organismos multicelulares apareceram em ambientes aquáticos.



- Curso da evolução tem sido moldado pelas propriedades do meio aquoso no qual a vida começou.

Poucos organismos resistem à desidratação

- Água presente no citosol das células é essencial ao metabolismo celular:
 - uma diminuição de 20% inibe o metabolismo
 - uma diminuição a 30% para completamente o metabolismo.
- Apenas algumas bactérias e arqueias resistem à desidratação de mais de 50% (esporos).
- Tardígrados também resistem a desidratação (treatise??? → proteínas desestruturadas).



Molecular Cell

Tardigrades Use Intrinsically Disordered Proteins to Survive Desiccation

Article

Água

- **Propriedades da água;**
- **Ligações de Hidrogênio;**
- **Água é uma molécula polar;**
- **Água e sistemas biológicos;**
- **Curiosidades e Discussão**

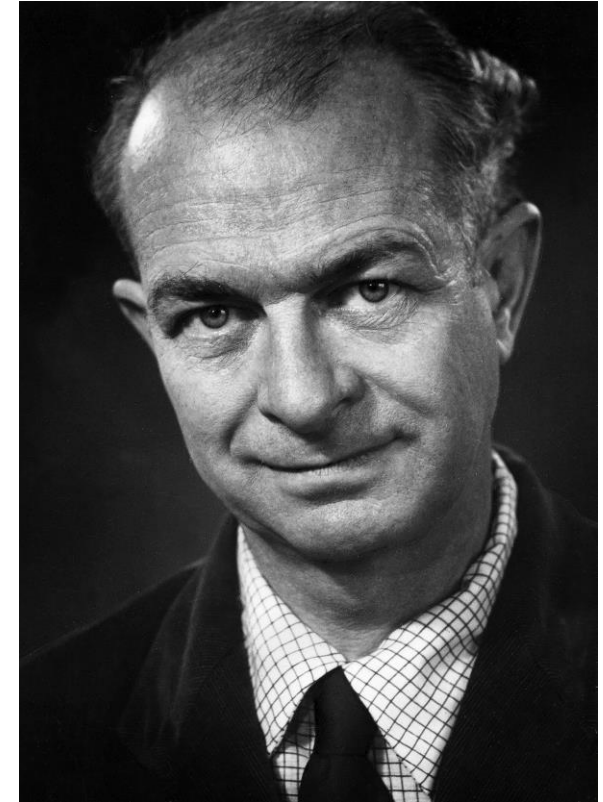
Água

- Propriedades da água;
- **Ligações de Hidrogênio;**
- Água é uma molécula polar;
- Água e sistemas biológicos;
- Curiosidades e Discussão

Ligações de hidrogênio

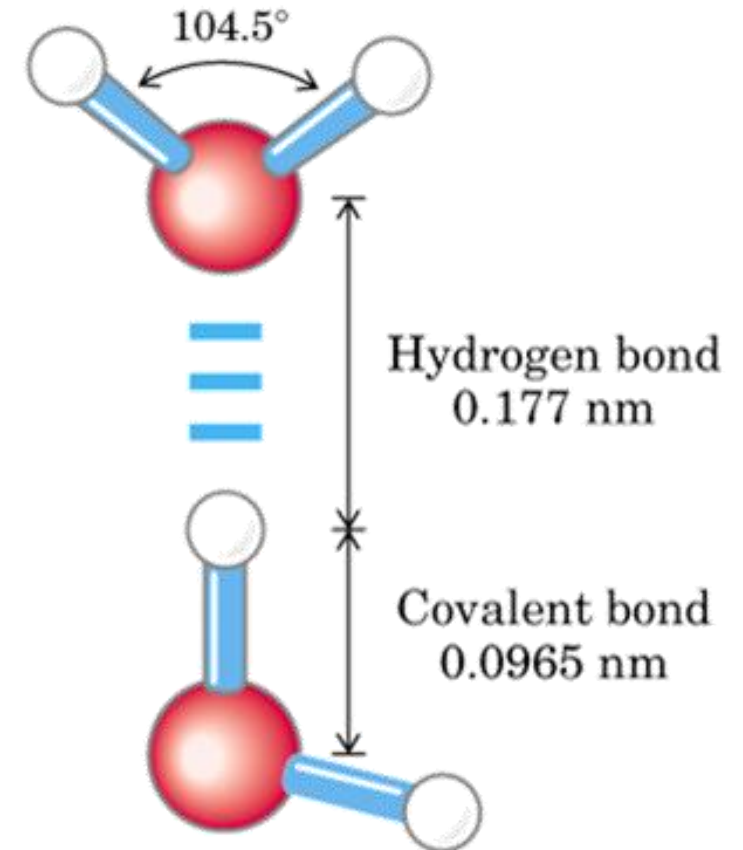
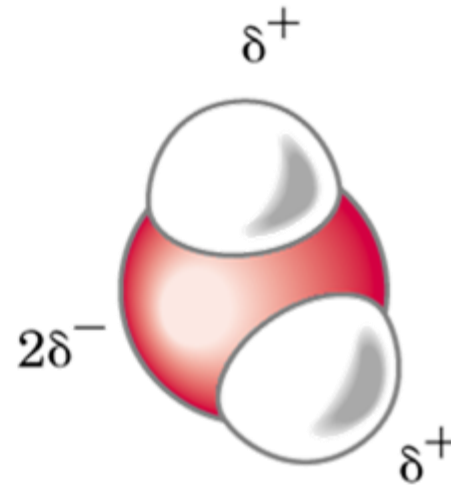
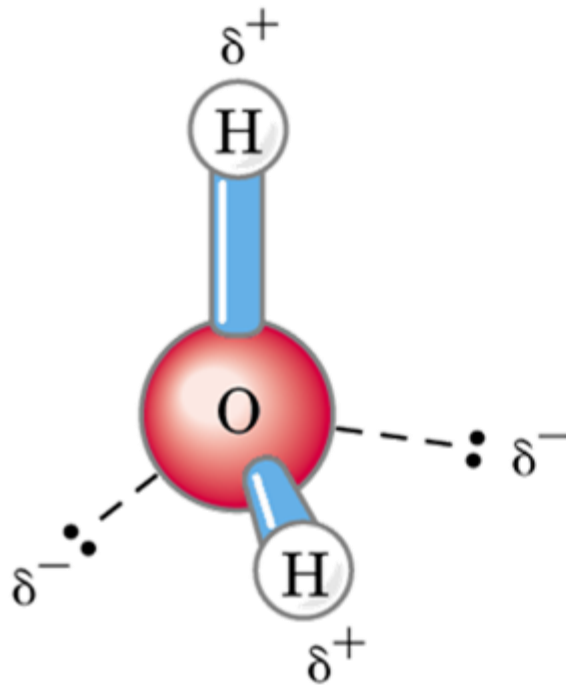
“À medida que os métodos da química estrutural forem aplicados a problemas fisiológicos, acredito que será descoberto que a importância das ligações de hidrogênio para a fisiologia é maior do que qualquer outra característica estrutural.”

Linus Carl Pauling
A natureza das ligações químicas, 1939



As moléculas de água estabelecem ligações eletrostáticas entre si (ligações de hidrogênio)

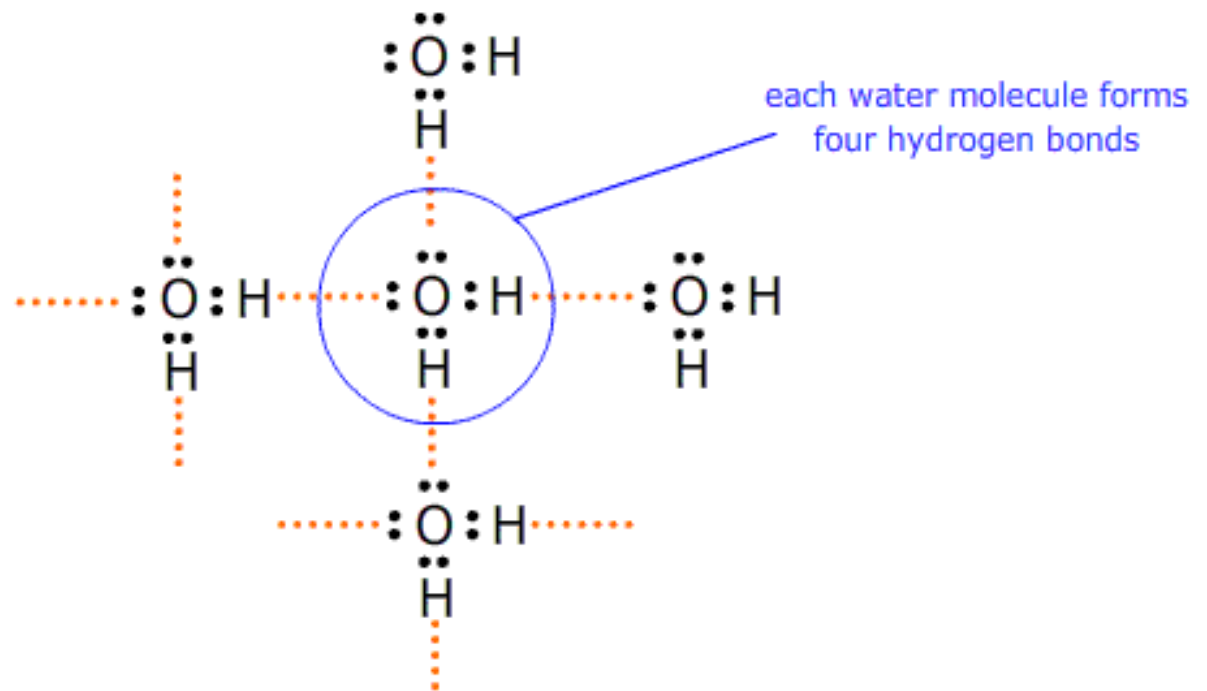
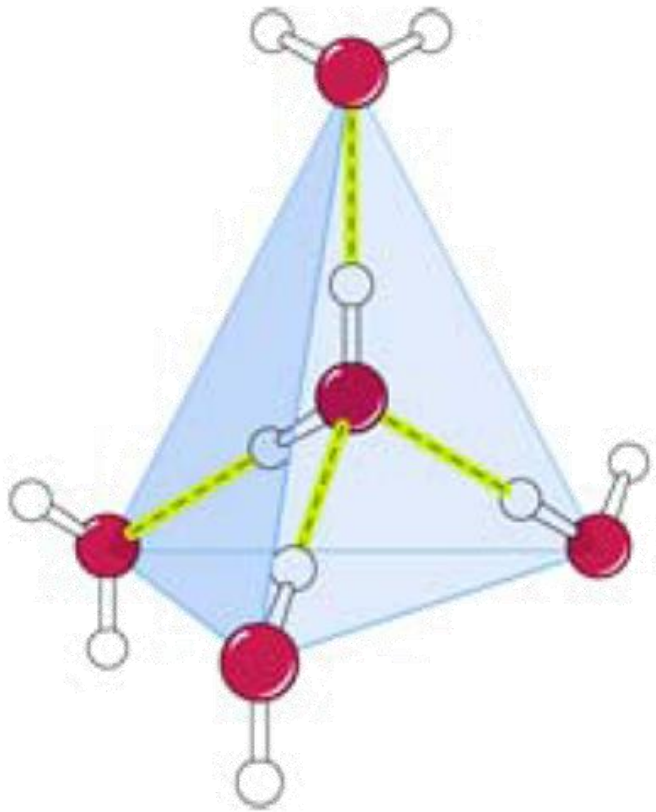
- Elétrons estão mais próximos do O, criando um dipolo elétrico.



- Ligações de hidrogênio possuem baixa energia de dissociação (23 kJ/mol);
- A energia de dissociação da ligação covalente O—H = 470 kJ/mol;

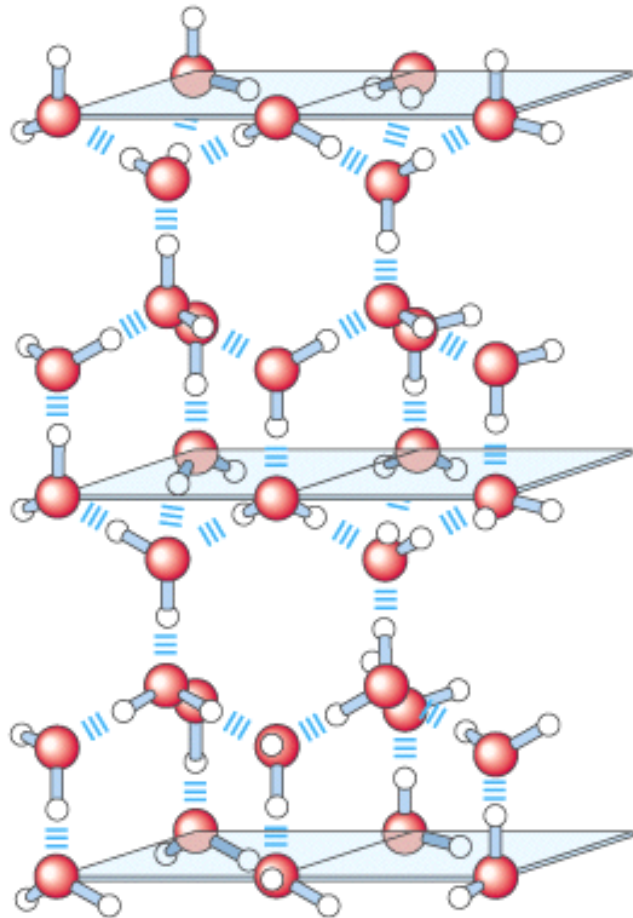
Ligações de hidrogênio

- Cada molécula de água pode formar até 4 ligações de hidrogênio;



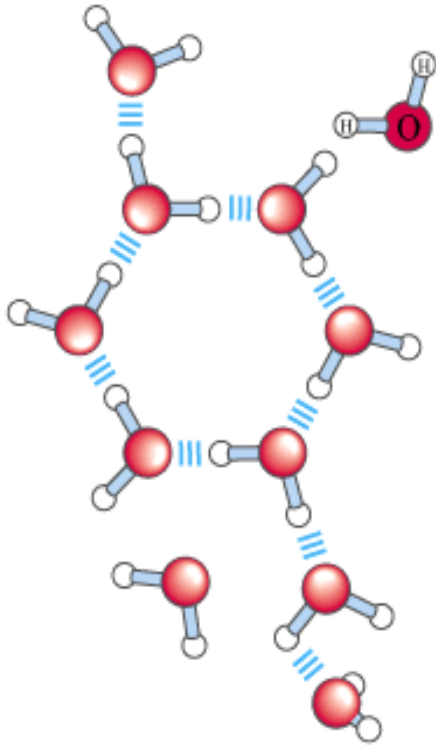
Ligações de hidrogênio

- A temperaturas $< 0\text{ }^{\circ}\text{C}$, cada molécula de água faz 4 ligações de hidrogênio umas com as outras, formando um arranjo cristalino;

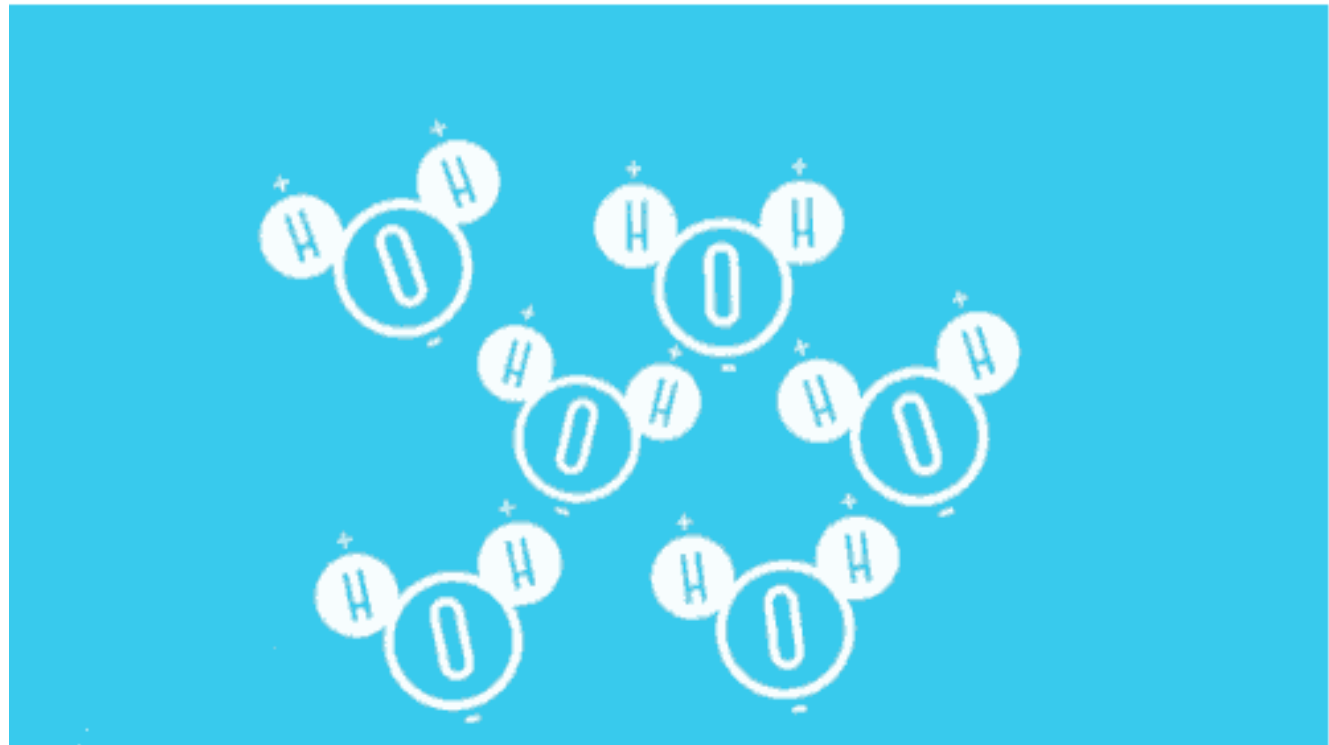


Ligações de hidrogênio

- Em sua forma líquida, a água faz a média de 3,4 ligações de hidrogênio devido aos grupos oscilantes (ligações são feitas e desfeitas repetidamente);

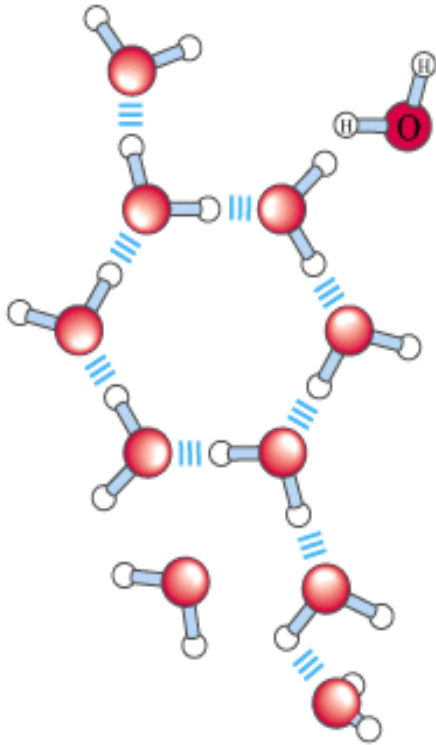


"Flickering clusters" of H_2O molecules in bulk phase

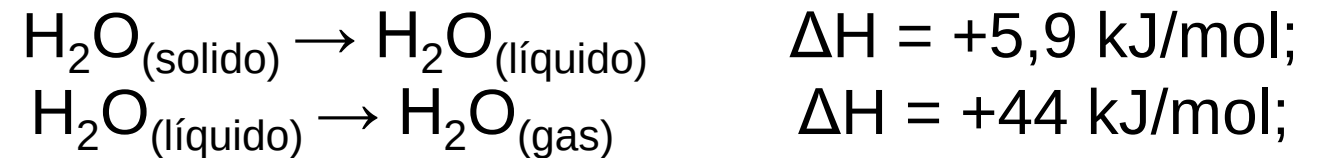


Ligações de hidrogênio

- As ligações de hidrogênio entre moléculas de água fornecem as forças coesivas que fazem da água um líquido a temperatura ambiente e um sólido cristalino (gelo), com arranjo altamente ordenado de moléculas, em temperaturas frias.



"Flickering clusters" of H₂O molecules in bulk phase



A temperatura ambiente, ambos processos ocorrem espontaneamente, já que ambos levam a um aumento da entropia (desordem).

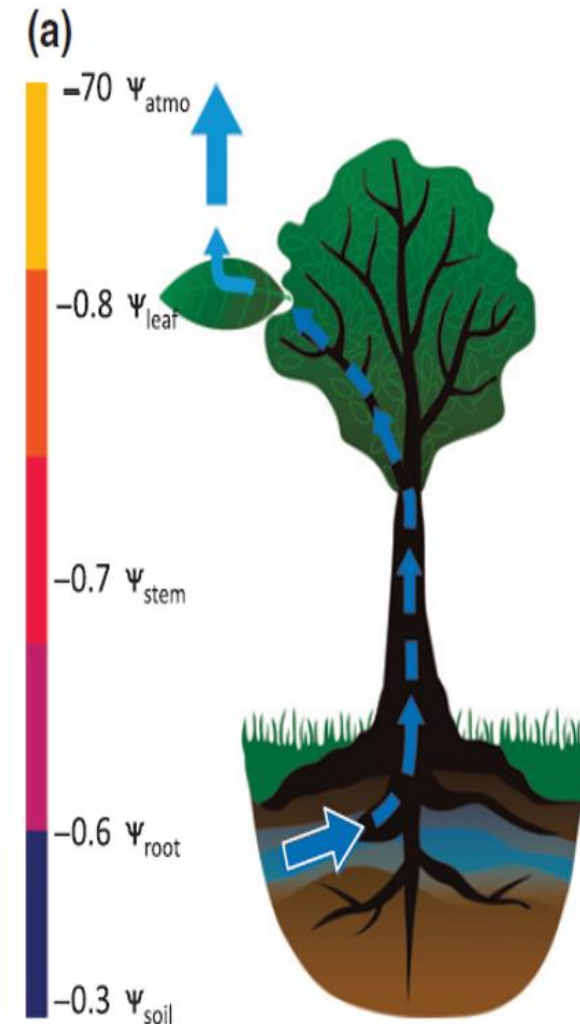
Ligações de hidrogênio são responsáveis pela tensão superficial da água

- A tensão superficial da água é uma das mais altas dos líquidos conhecidos ($7,2 \cdot 10^{-3} \text{ N.m}^{-1}$).
- Essa alta tensão superficial explica alguns fenômenos:



Ligações de hidrogênio são responsáveis pelas forças coesivas da água

- As forças coesivas da água são responsáveis pelo gradiente de potencial hídrico das plantas.



Ligações de hidrogênio

As ligações de hidrogênio fazem com que a água tenha propriedades particulares.

TABELA 2-1 Ponto de fusão, ponto de ebulição e calor de vaporização de alguns solventes comuns

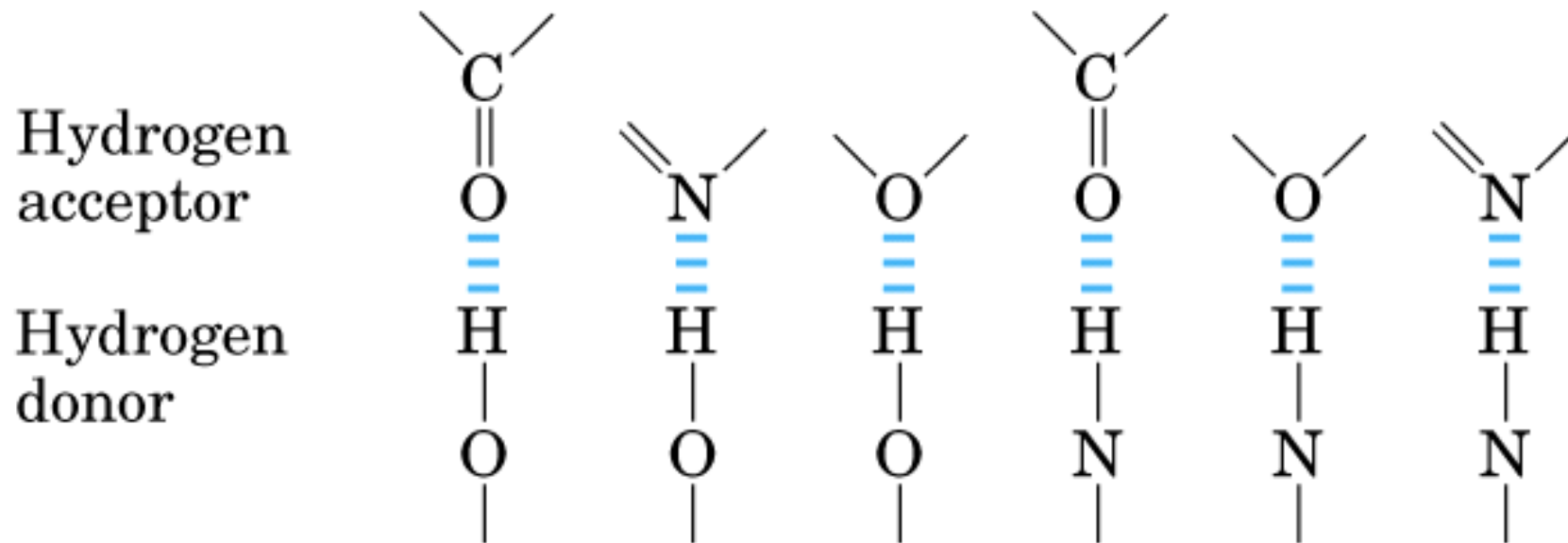
	Ponto de fusão (°C)	Ponto de ebulição (°C)	Calor de vaporização (J/g)*
Água	0	100	2.260
Metanol (CH ₃ OH)	-98	65	1.100
Etanol (CH ₃ CH ₂ OH)	-117	78	854
Propanol (CH ₃ CH ₂ CH ₂ OC)	-127	97	687
Butanol (CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₂ OC)	-90	117	590
Acetona (CH ₃ COCH ₃)	-95	56	523
Hexano (CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃)	-98	69	423
Benzeno (C ₆ H ₆)	6	80	394
Butano (CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃)	-135	-0,5	381
Clorofórmio (CHCl ₃)	-63	61	247

*A energia na forma de calor necessária para levar 1,0 g de um líquido no seu ponto de ebulição e na pressão atmosférica até seu estado gasoso na mesma temperatura. Essa é uma medida direta da energia necessária para superar as forças de atração entre as moléculas na fase líquida.

A água tem ponto de fusão, ebulição e calor de vaporização mais alto que os outros solventes comuns.

Ligações de hidrogênio de importância biológica

- As ligações de hidrogênio não são exclusivas para a molécula de água. Elas se formam prontamente entre um átomo eletronegativo (aceptor de hidrogênio, geralmente oxigênio ou nitrogênio) e um átomo de hidrogênio ligado covalentemente a outro átomo eletronegativo (doador de hidrogênio) na mesma molécula ou em outra.

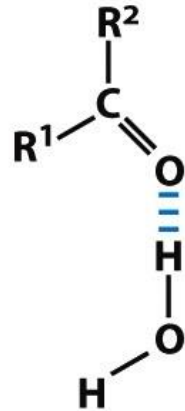


Água pode formar ligações de hidrogênio com outras moléculas polares

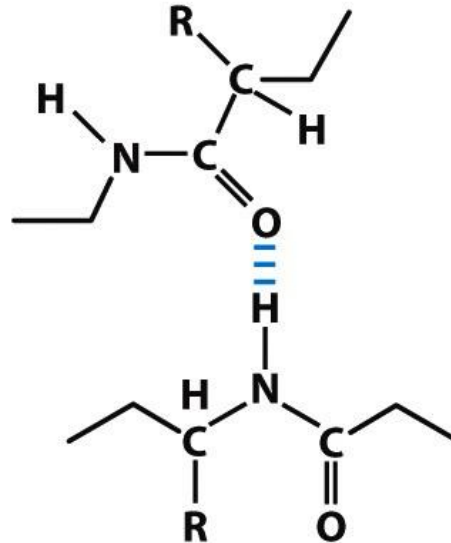
Between the hydroxyl group of an alcohol and water



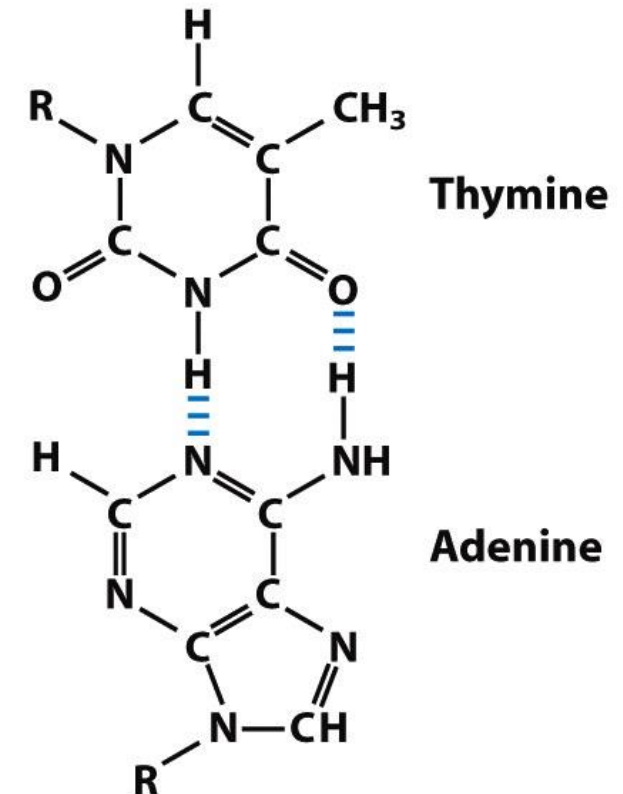
Between the carbonyl group of a ketone and water



Between peptide groups in polypeptides

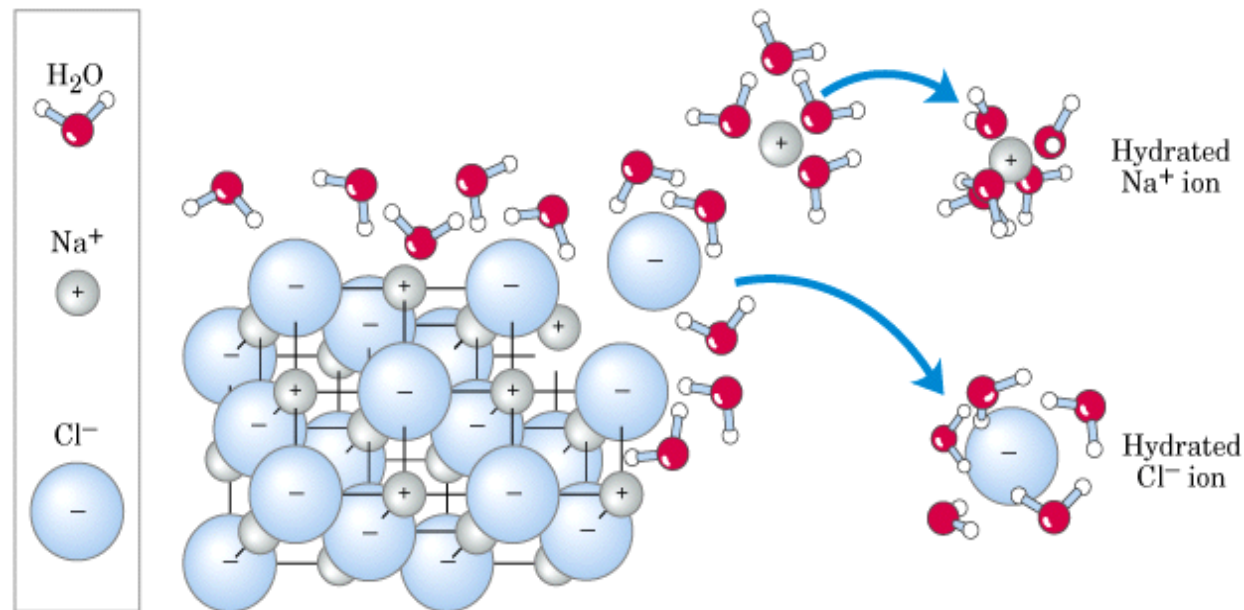


Between complementary bases of DNA



Água como solvente

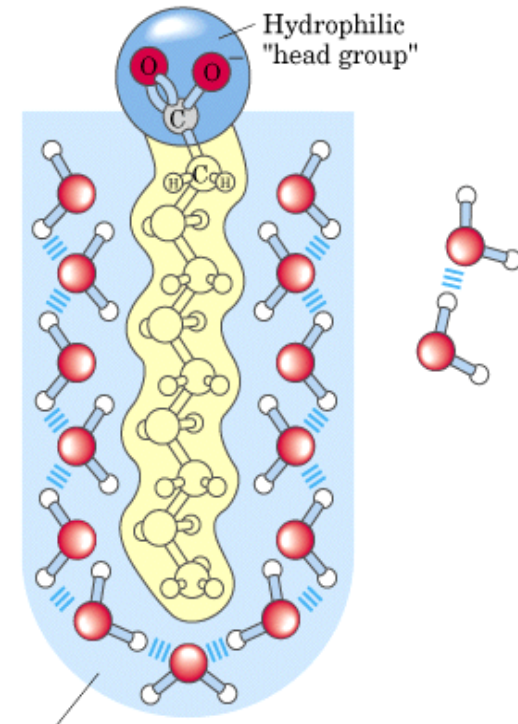
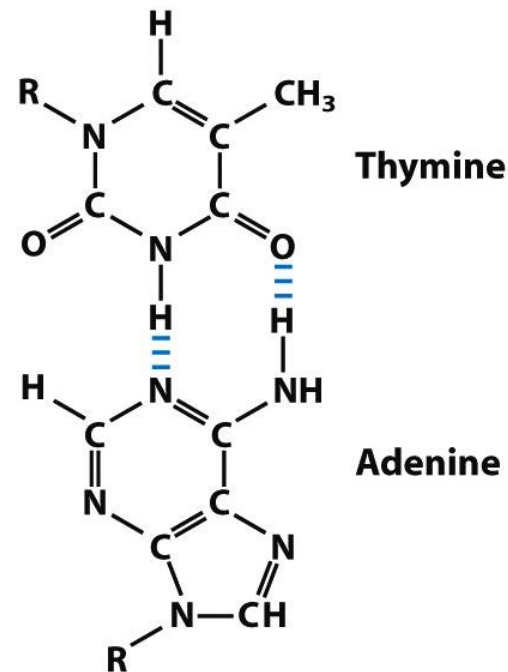
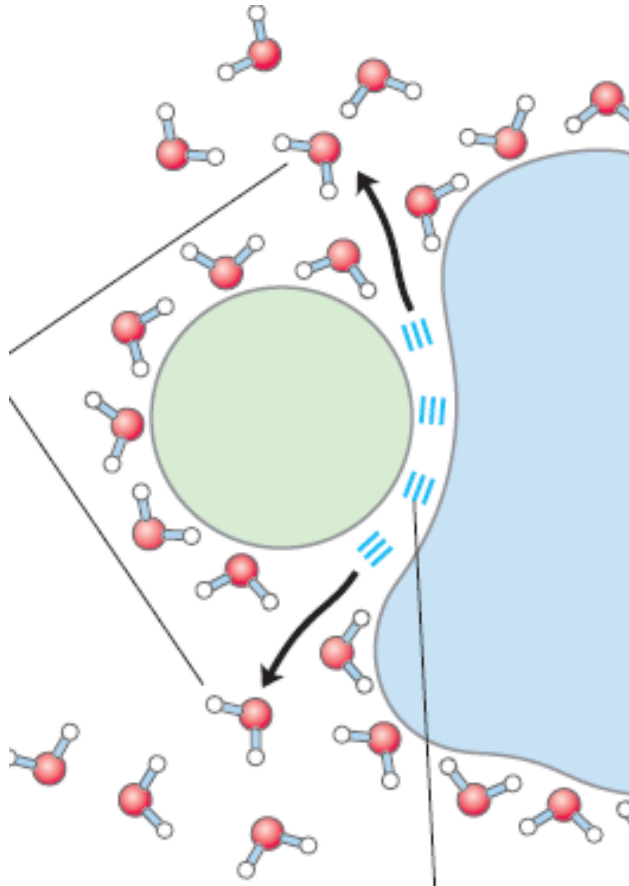
- A água interage eletrostaticamente com solutos carregados. A água dissolve muitos sais cristalinos pela hidratação de seus íons. A rede cristalina do NaCl é desfeita quando as moléculas de água se aglomeram ao redor dos íons Cl^- e Na^+ . As cargas iônicas são parcialmente neutralizadas.



- O aumento resultante na entropia do sistema (grau de desordem) é em grande parte responsável pela facilidade da dissolução dos sais como NaCl em água.

Água influencia o comportamento de todos os componentes celulares

- A molécula de água e seus produtos de ionização, H^+ e OH^- , influenciam profundamente a estrutura, a organização e as propriedades de todos os componentes celulares, incluindo proteínas, ácidos nucleicos e lipídeos.



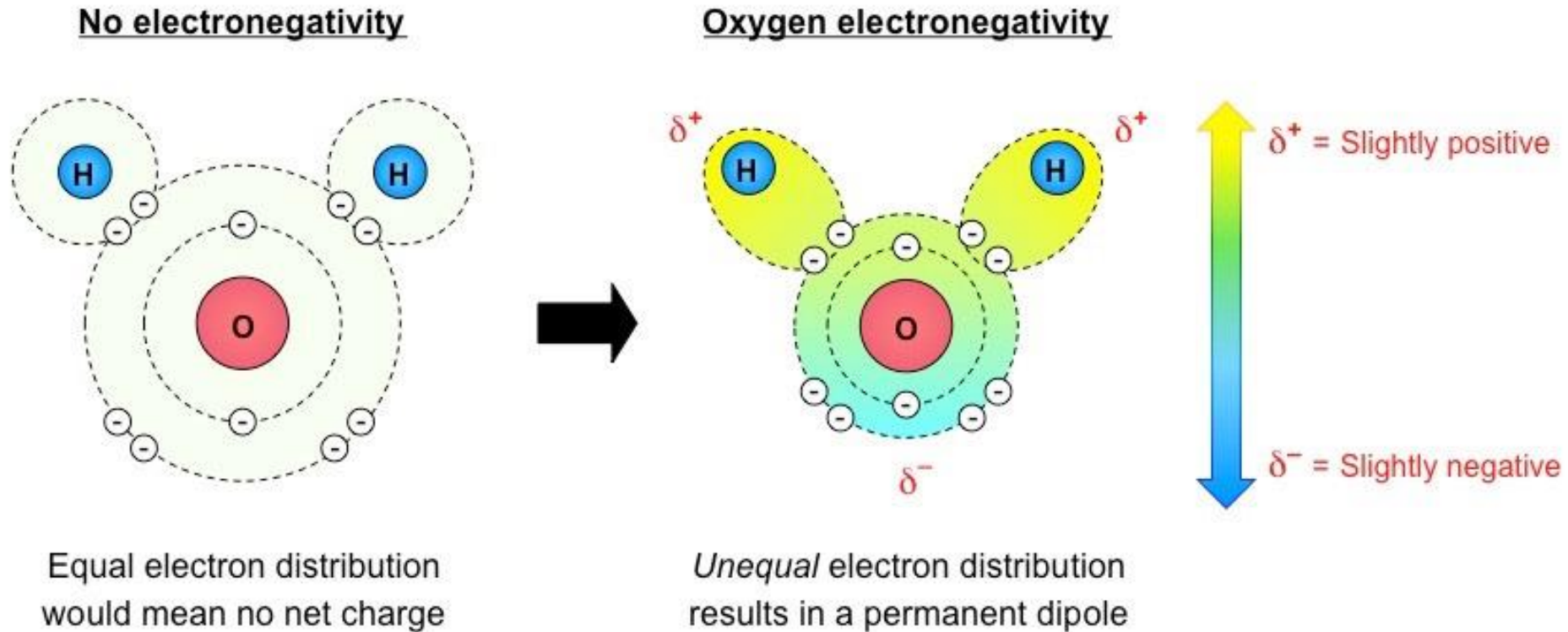
Água

- **Propriedades da água;**
- **Ligações de Hidrogênio;**
- **Água é uma molécula polar;**
- **Água e sistemas biológicos;**
- **Curiosidades e Discussão**

Água

- Propriedades da água;
- Ligações de Hidrogênio;
- **Água é uma molécula polar;**
- Água e sistemas biológicos;
- Curiosidades e Discussão

A distribuição eletrônica desigual entre os átomos de O e H resulta na formação de um dipolo permanente (polaridade)



Distribuição eletrônica desigual $\rightarrow \mu_R \neq 0$, onde μ_R = soma dos vetores momento dipolar

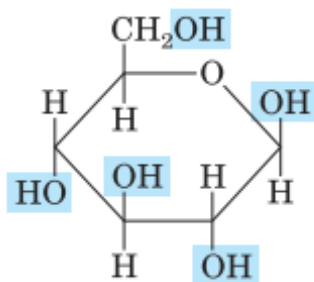
Água pode solubilizar outras moléculas com grupos polares

TABELA 2-2

Alguns exemplos de biomoléculas polares, apolares e anfipáticas (mostradas nas suas formas ionizadas em pH 7)

Polar

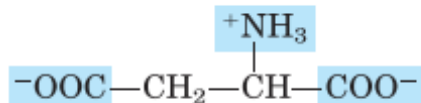
Glicose



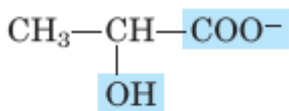
Glicina



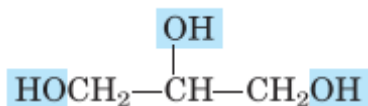
Aspartato



Lactato

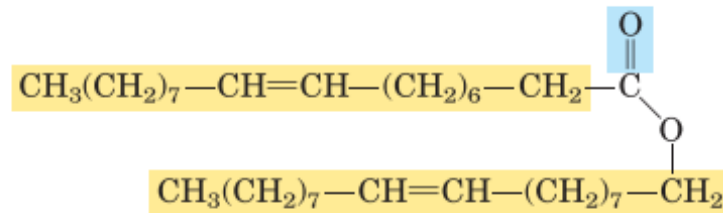


Glycerol



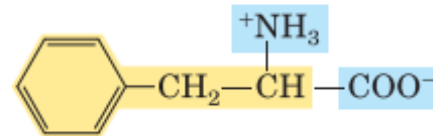
Apolar

Cera comum

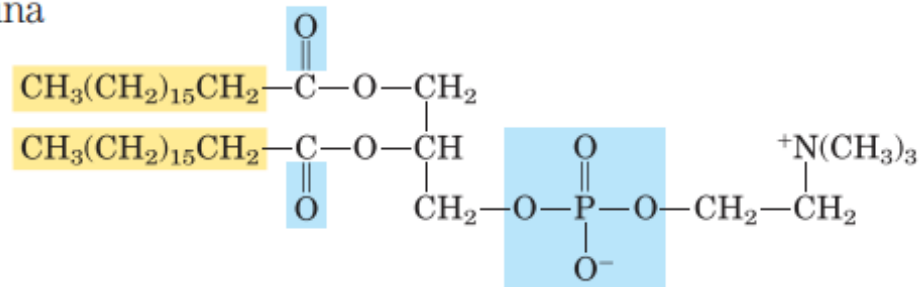


Anfipática

Fenilamina



Fosfatidilcolina

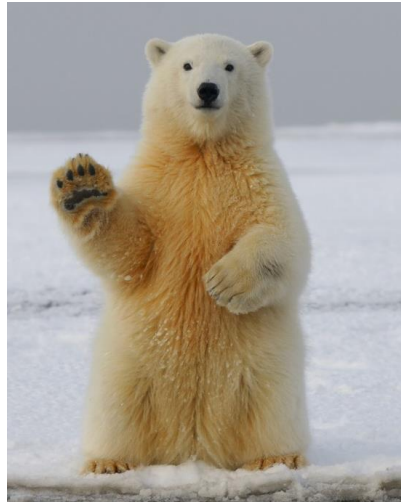
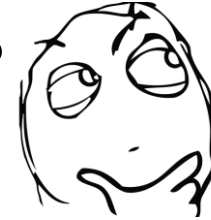


Grupos polares

Grupos apolares

Momento da piada sem graça

Um urso caiu na água e dissolveu. Por que?

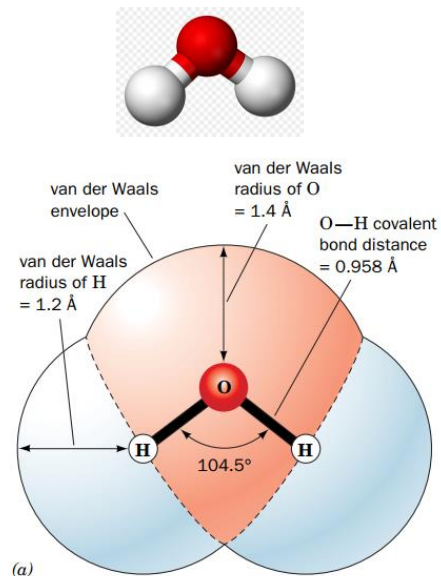


Porque ele era um urso polar



Por que polar solubiliza polar e apolar solubiliza apolar?

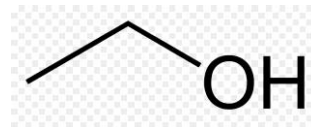
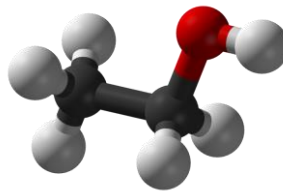
Água



polar

$$\mu_R \neq 0$$

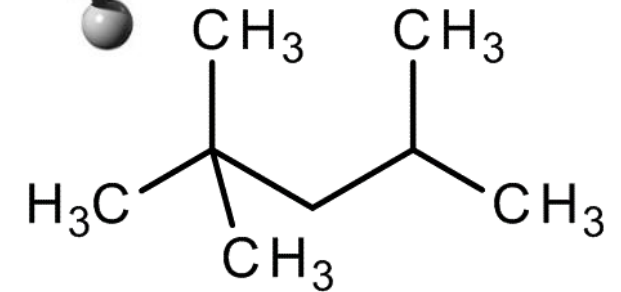
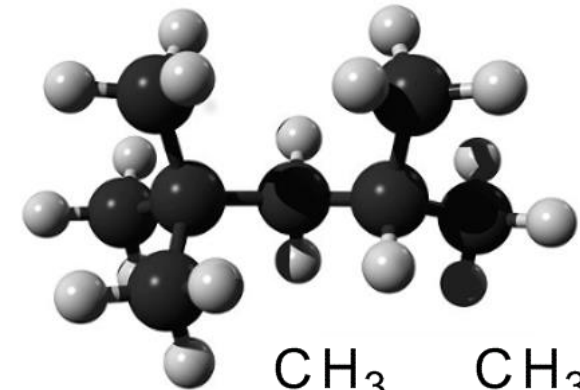
Etanol



apolar

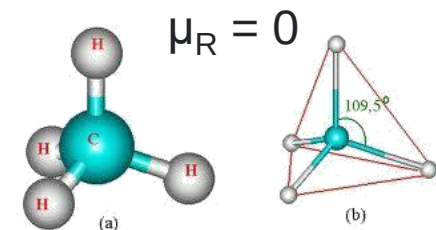
polar

2,2,4-trimetilpentano (gasolina)



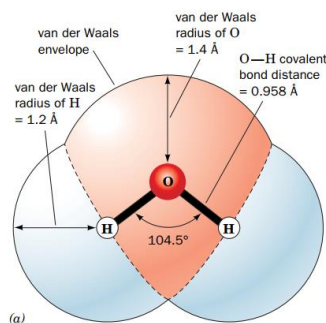
apolar

μ_R = soma dos vetores momento dipolar



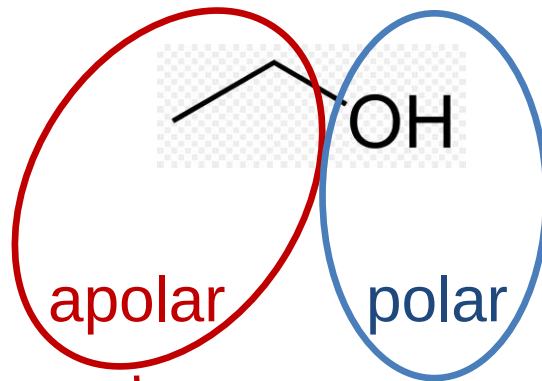
Por que polar solubiliza polar e apolar solubiliza apolar?

Água

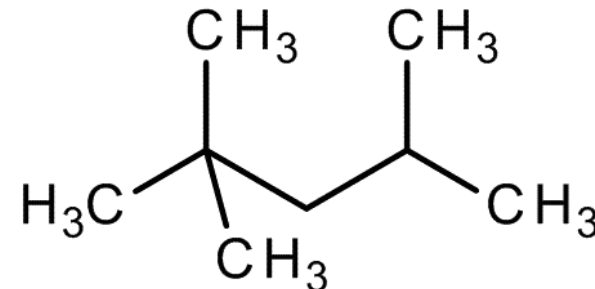


polar

Etanol



2,2,4-trimetilpentano (gasolina)

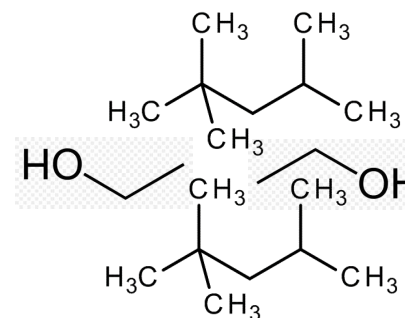


apolar

Ligações de hidrogênio



Forças de van der Waals



Etanol é uma molécula anfipática!

A solubilidade de gases em água também depende de sua polaridade

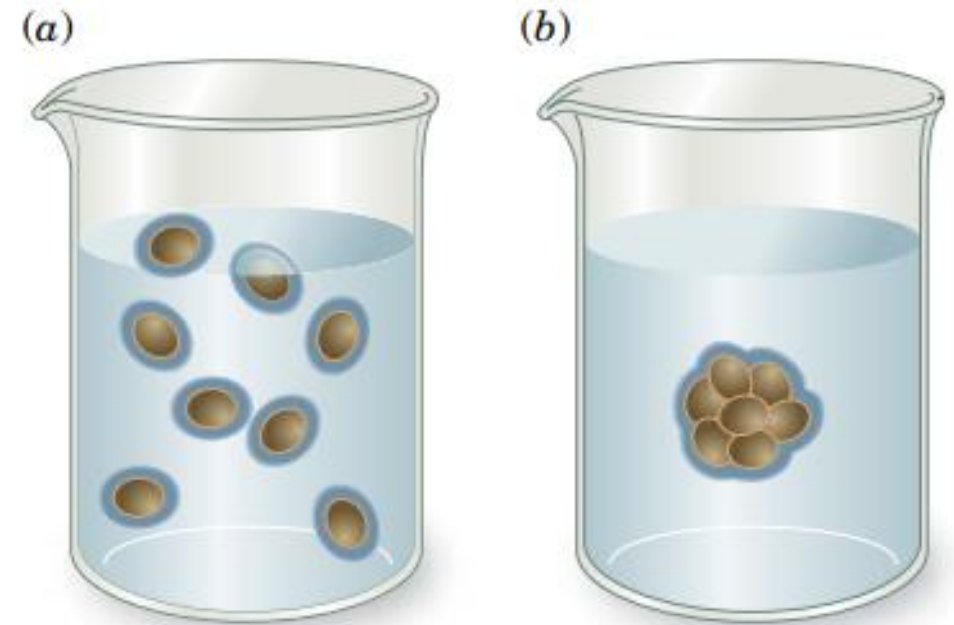
TABELA 2-3 Solubilidade de alguns gases na água

Gás	Estrutura*	Polaridade	Solubilidade em água (g/L) [†]
Nitrogênio	$\text{N}\equiv\text{N}$	Apolar	0,018 (40°C)
Oxigênio	$\text{O}=\text{O}$	Apolar	0,035 (50°C)
Dióxido de carbono	$\begin{array}{c} \delta- \quad \quad \delta- \\ \longleftrightarrow \\ \text{O}=\text{C}=\text{O} \end{array}$	Apolar	0,097 (45°C)
Amônia	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \diagdown \quad \quad / \\ \text{N} \\ \downarrow \delta- \end{array}$	Polar	900 (10°C)
Sulfeto de hidrogênio	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \diagdown \quad / \\ \text{S} \\ \downarrow \delta- \end{array}$	Polar	1.860 (40°C)

*As setas representam os dipolos elétricos; existe uma carga parcial negativa (δ^-) na ponta da seta, e uma carga parcial positiva (δ^+ ; não mostrado aqui) na outra extremidade.

[†]Observe que as moléculas polares dissolvem melhor, mesmo em temperaturas baixas, que as moléculas apolares em temperaturas relativamente altas.

Óleo é uma molécula apolar ($\mu_R = 0$), portanto não se dissolve em água



- Moléculas apolares tendem a se agregar em água.

Água

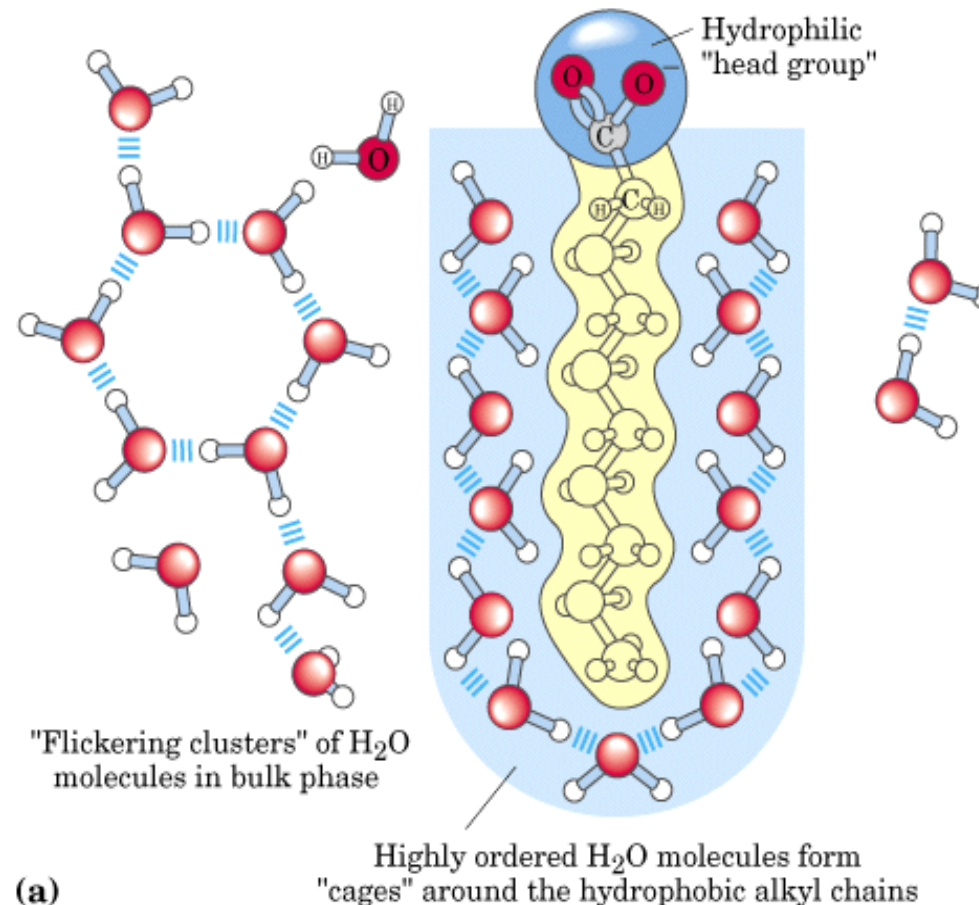
- **Propriedades da água;**
- **Ligações de Hidrogênio;**
- **Água é uma molécula polar;**
- **Água e sistemas biológicos;**
- **Curiosidades e Discussão**

Água

- Propriedades da água;
- Ligações de Hidrogênio;
- Água é uma molécula polar;
- **Água e sistemas biológicos;**
- Curiosidades e Discussão

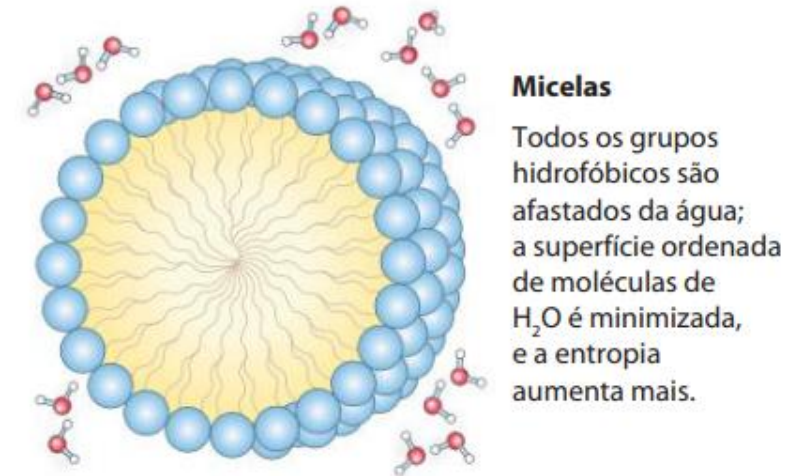
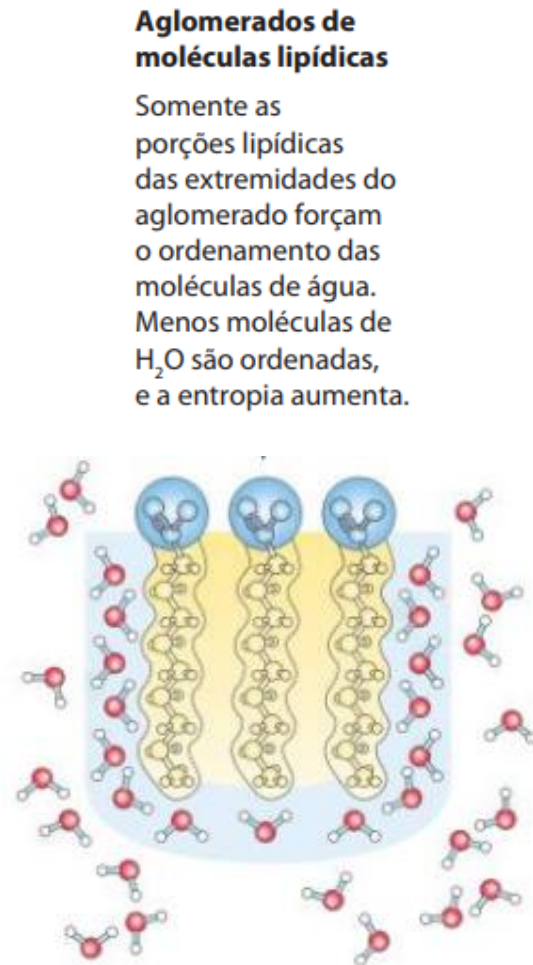
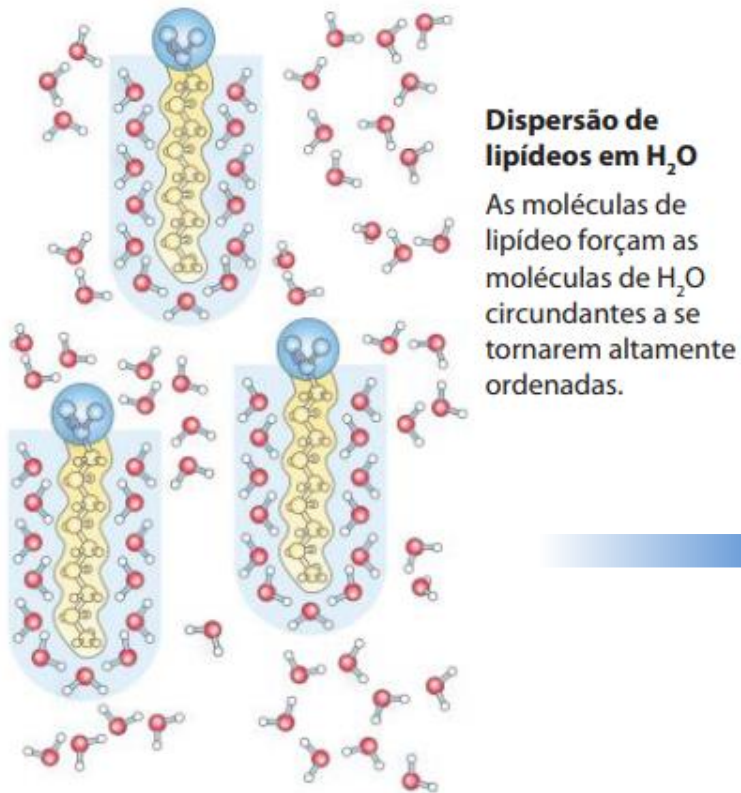
A ausência de polaridade de moléculas lipídicas tem importância fundamental em sistemas biológicos

- Moléculas de água tendem a se ordenar ao redor da cadeia hidrofóbica.



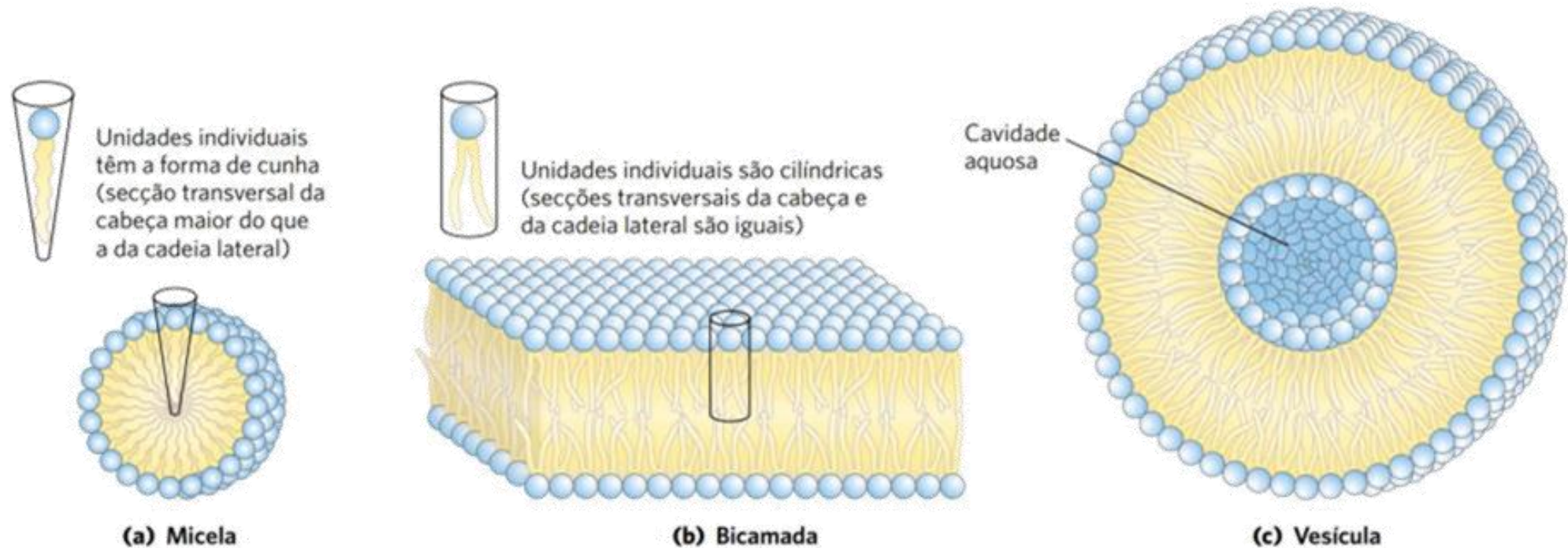
Ambiente aquoso direciona a formação de micelas

- Porções hidrofóbicas interagem entre si e diminuem o número de moléculas de água organizadas ao redor: $\uparrow$ Entropia.



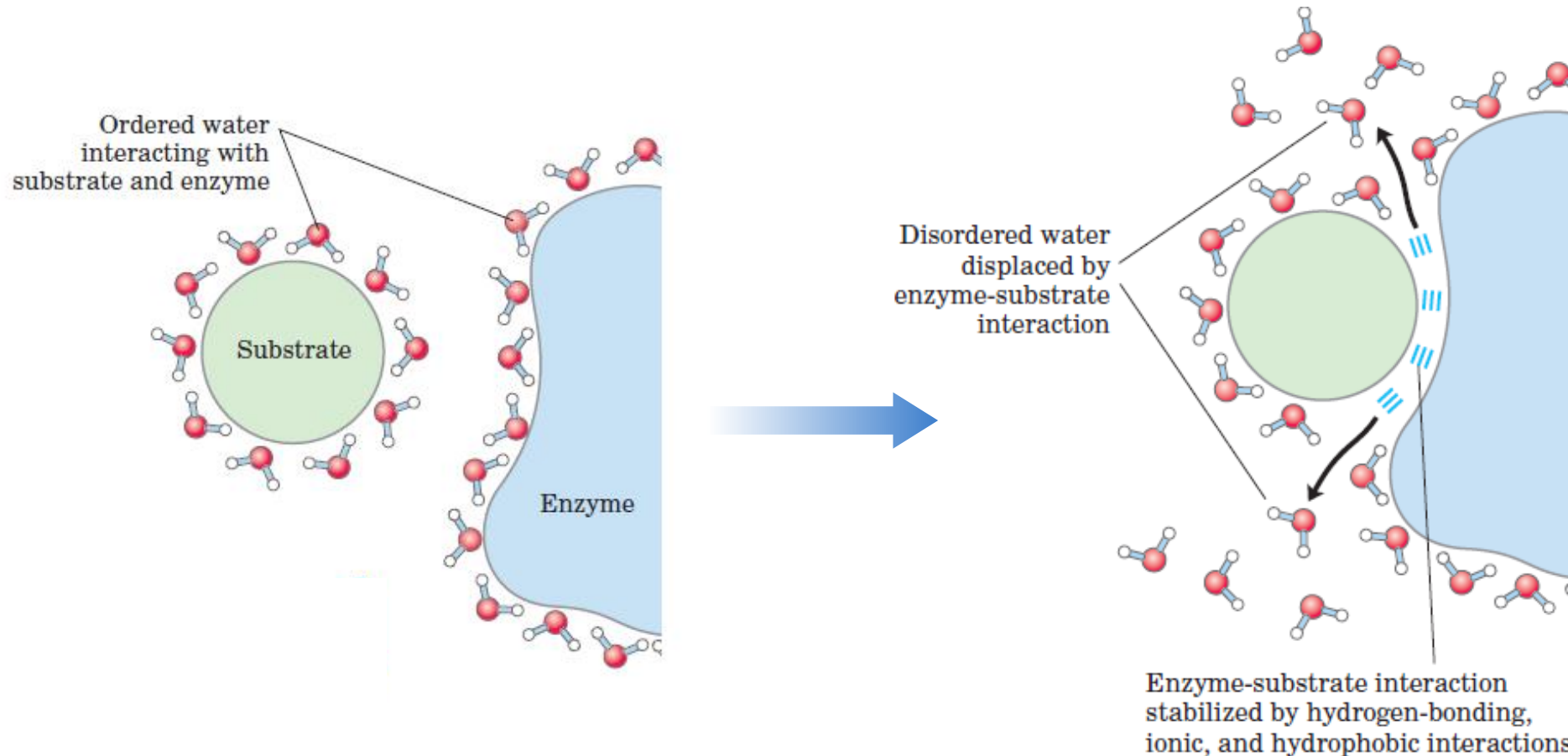
Ambiente aquoso direciona a formação de membranas biológicas

- Porções hidrofóbicas interagem entre si e diminuem o número de moléculas de água organizadas ao redor: $\uparrow$ Entropia.



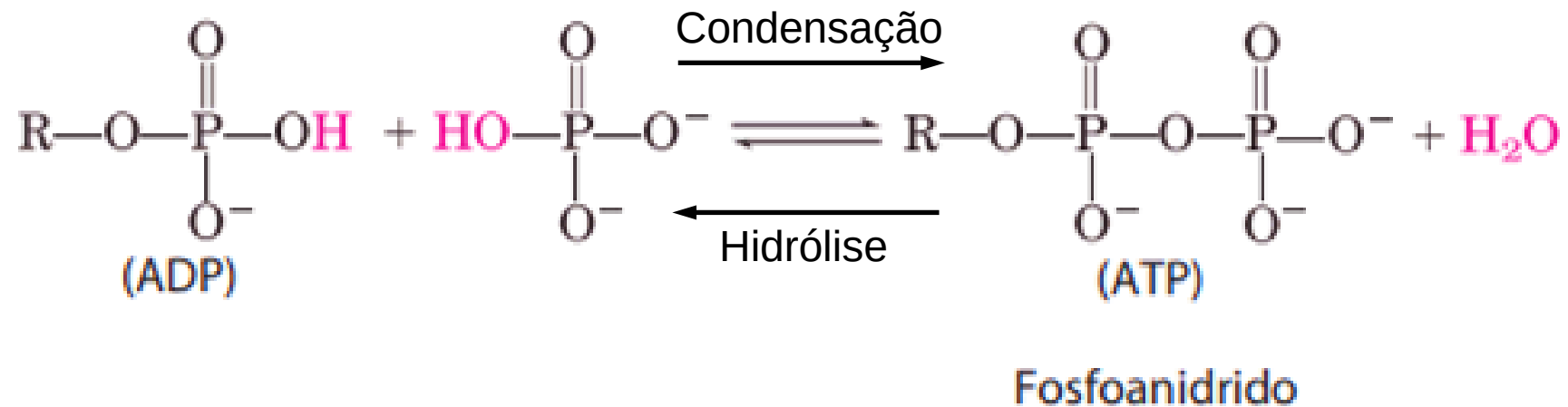
Ligações de H entre água e biomoléculas desempenham um papel fundamental em sistemas biológicos

- Exemplo: Estabilização do complexo enzima-substrato.



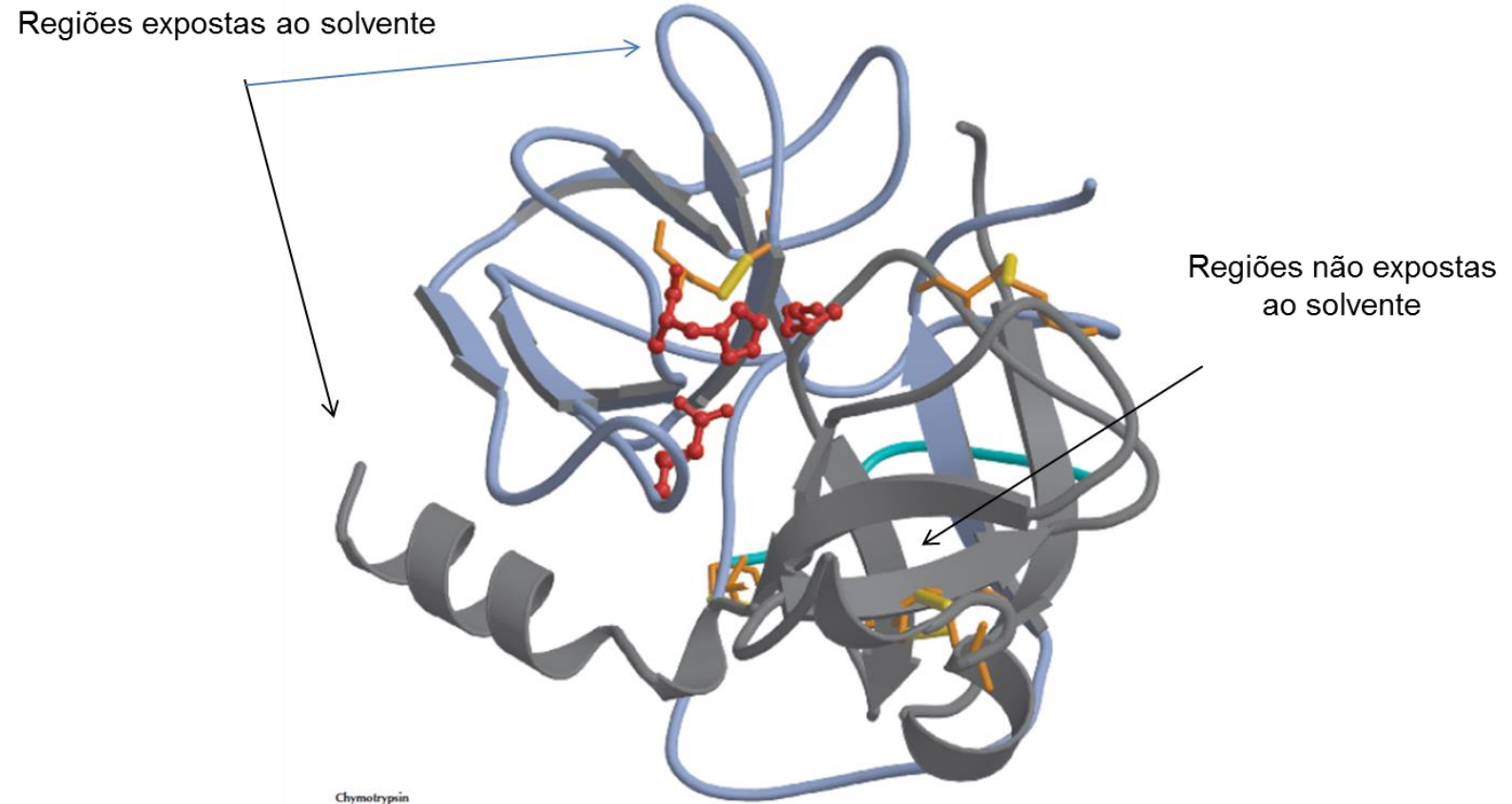
Água como reagente

- A água não é apenas o solvente no qual as reações químicas das células vivas ocorrem; é muitas vezes um participante direto nessas reações.



Outras interações não-covalentes entre grupos funcionais de biomoléculas contribuem para a manutenção da estrutura e função dessas moléculas

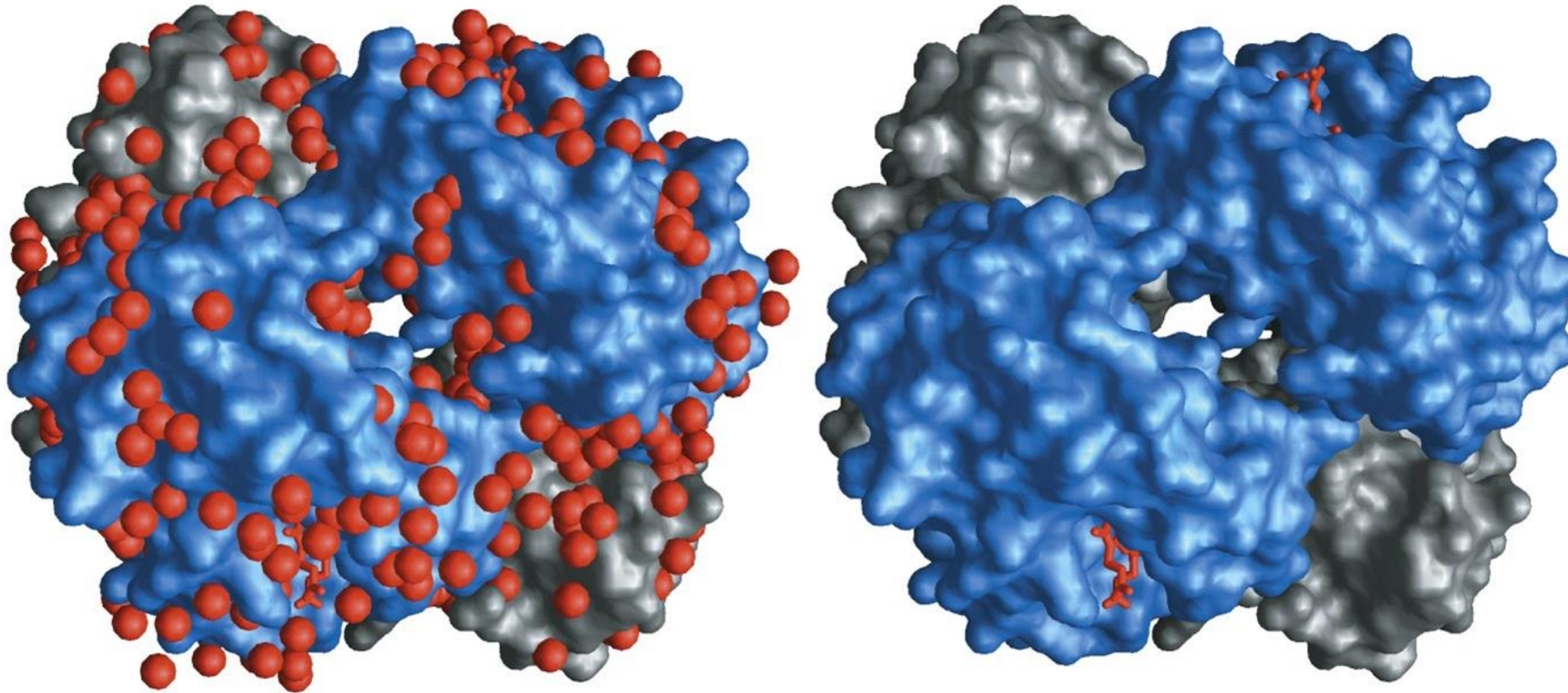
- Forças de van der Waals;
- Interações hidrofóbicas;
- Interações iônicas;
- Pontes dissulfeto;



Outras interações não-covalentes entre grupos funcionais de biomoléculas contribuem para a manutenção da estrutura e função dessas moléculas

- A água pode fazer parte da estrutura de uma macromolécula.

Hemoglobina ligada a
moléculas de água

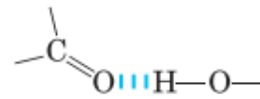


Outras interações não-covalentes entre grupos funcionais de biomoléculas contribuem para a manutenção da estrutura e função dessas moléculas

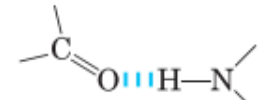
TABELA 2-5 Os quatro tipos de interações não covalentes ("fracas") entre biomoléculas em solvente aquoso

Ligações de hidrogênio

Entre grupos neutros



Entre ligações peptídicas



Interações iônicas

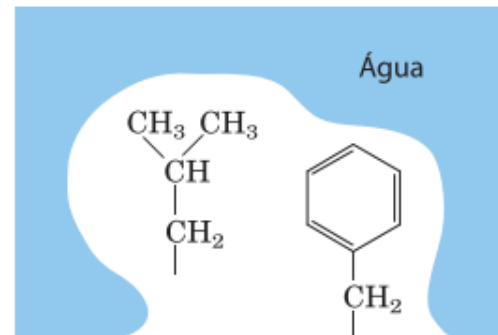
Atração



Repulsão



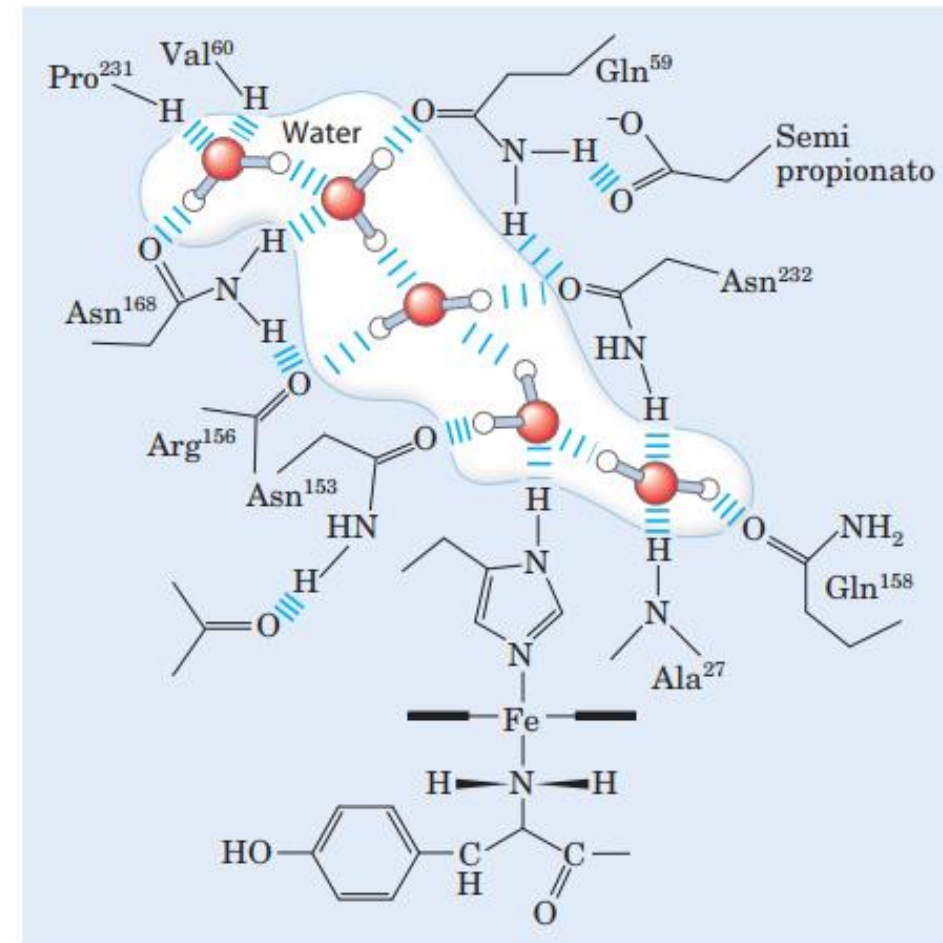
Interações hidrofóbicas



Interações de van der Waals

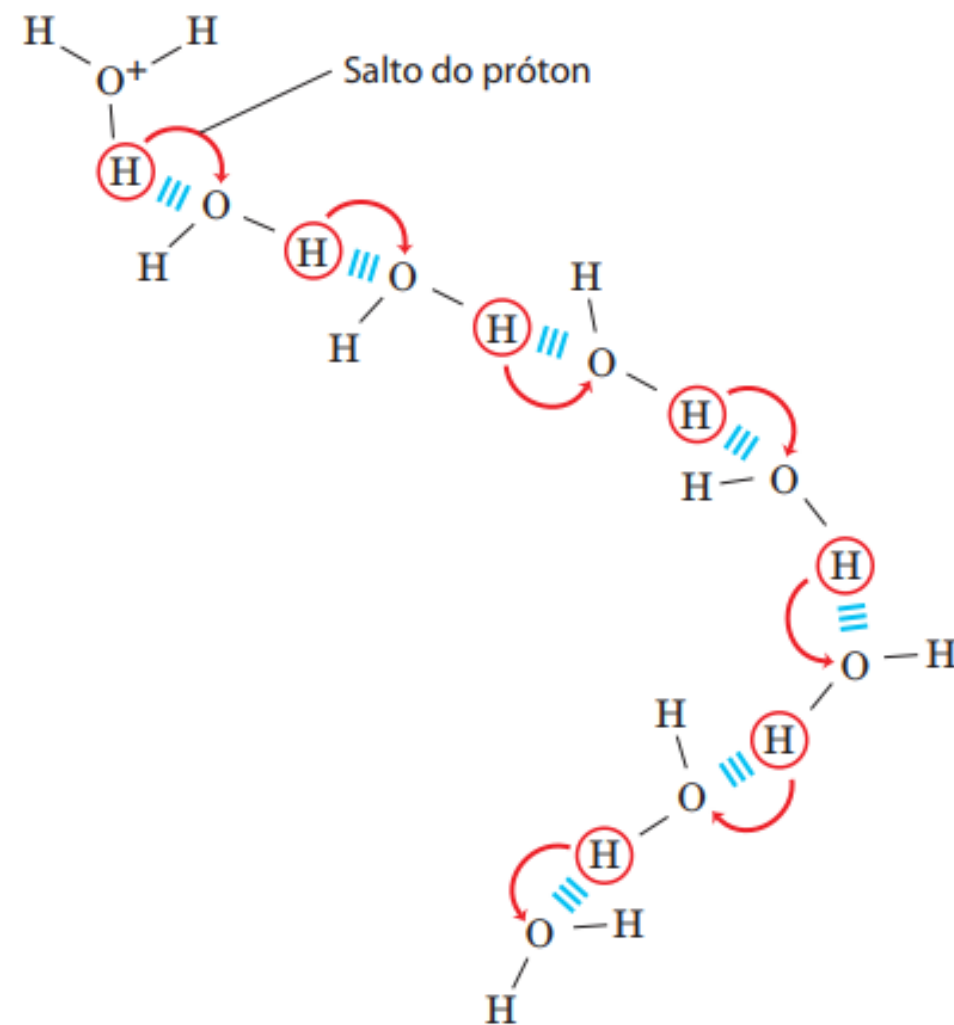
Dois átomos quaisquer bem próximos um do outro

Cadeia de água formando um canal de prótons no citocromo f



Salto de prótons

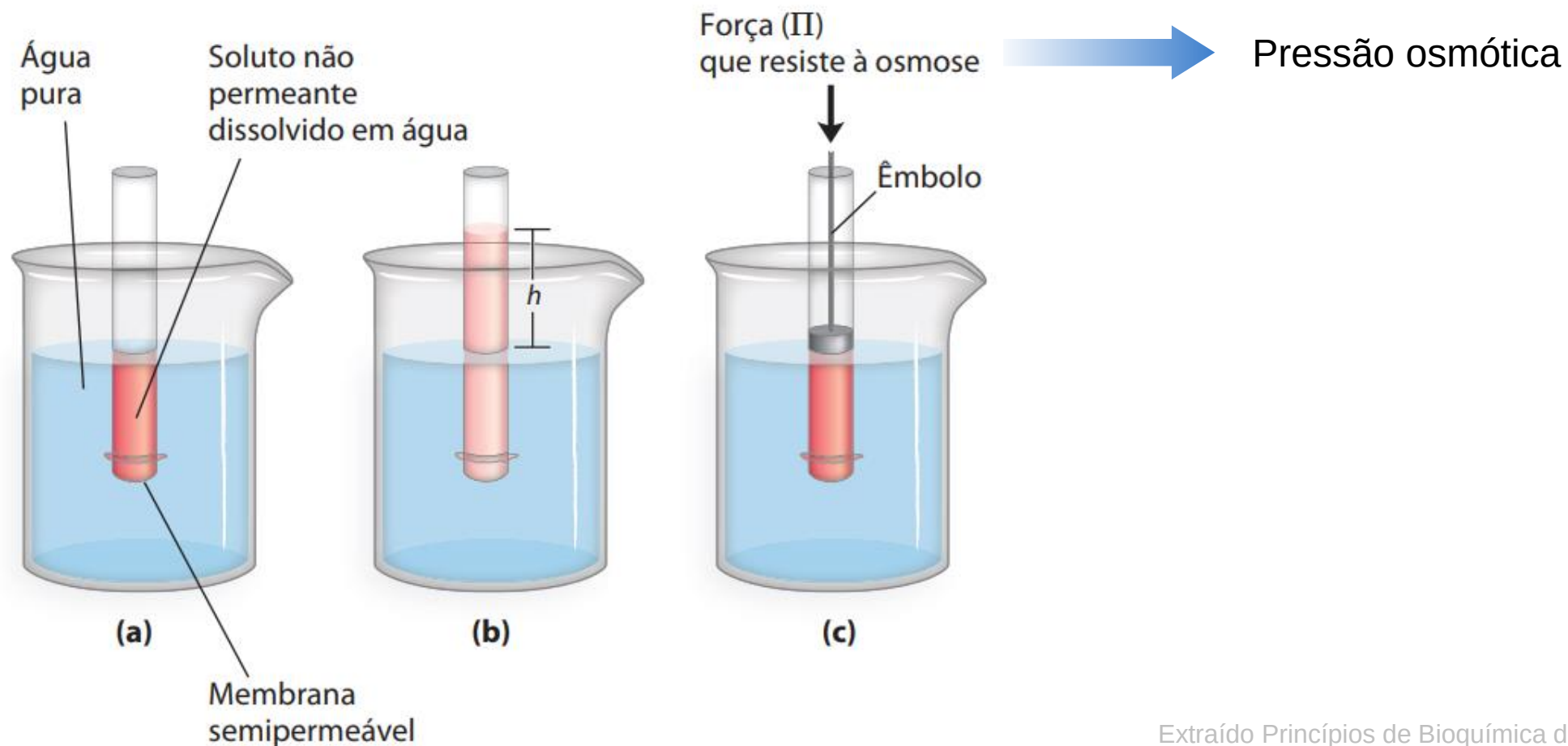
- Os prótons individuais não se movem para muito longe na solução, mas uma série de prótons salta entre as moléculas de água ligadas por hidrogênio e gera um movimento líquido de prótons por uma longa distância em um tempo extremamente curto.
- O salto de prótons muito provavelmente exerce uma função nas reações biológicas de transferência de prótons.



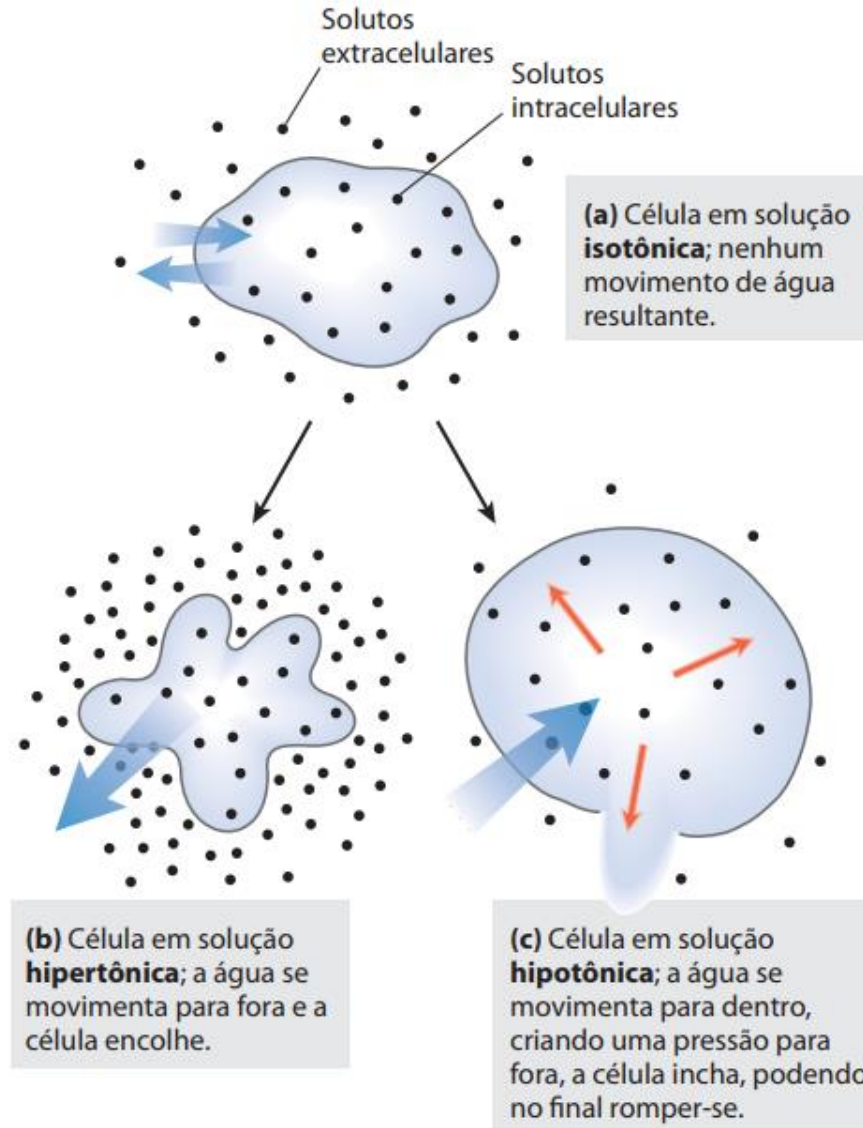
Água aceita um próton e se torna um íon hidrônio

Osmose

- Osmose, o movimento da água através de uma membrana semipermeável ocasionado por diferenças na pressão osmótica, é um fator importante na vida de grande parte das células.



Efeito da osmolaridade extracelular no movimento da água através de uma membrana plasmática



Água

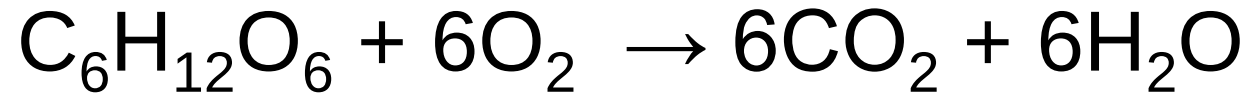
- **Propriedades da água;**
- **Ligações de Hidrogênio;**
- **Água é uma molécula polar;**
- **Água e sistemas biológicos;**
- **Curiosidades e Discussão**

Água

- Propriedades da água;
- Ligações de Hidrogênio;
- Água é uma molécula polar;
- Água e sistemas biológicos;
- **Curiosidades e Discussão**

Curiosidades

- A água e o dióxido de carbono são os produtos finais da oxidação de nutrientes como a glicose.



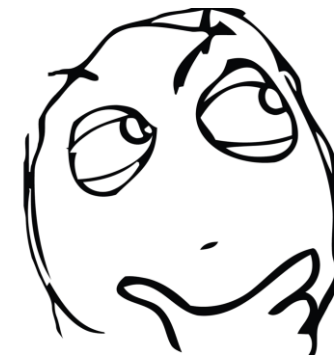
Essa “água metabólica” formada pela oxidação de alimentos e gorduras armazenadas é suficiente para permitir que alguns animais sobrevivam sem beber água por longos períodos de tempo em ambientes secos.



Discussão

Água

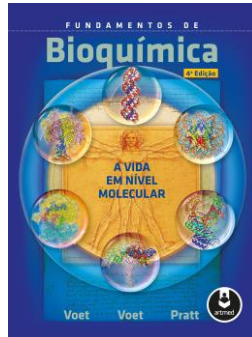
- Qual a molaridade da água? Qual a relação entre pH e água?



Bibliografia

Referências básicas

- NELSON, David. L. e COX, Michael M. **Princípios de Bioquímica de Lehninger**. Porto Alegre: Artmed, 2018. **Parte 1, Capítulo 2**
- Voet, Donald, et al., **Fundamentos de Bioquímica: A vida no nível molecular**. Porto Alegre: Artmed, 2017. **Parte I, Capítulo 2**



Obrigado pela atenção!

Dúvidas? Não hesitem em escrever no fórum de
dúvidas e discussões no e-disciplinas