



Características da Água

Bioquímica e Biofísica

Prof. Dr. Tiago R. Figueira

Importância da compreensão das características físico-químicas da água

- A água compõe ~70% da massa da célula
 - As estruturas e funções das células estão adaptadas às características físico-químicas da água.
-
- Forças de atração, por ponte de hidrogênio, entre moléculas de água
 - Estabelece interações com os solutos
 - Tendência de se ionizar parcialmente

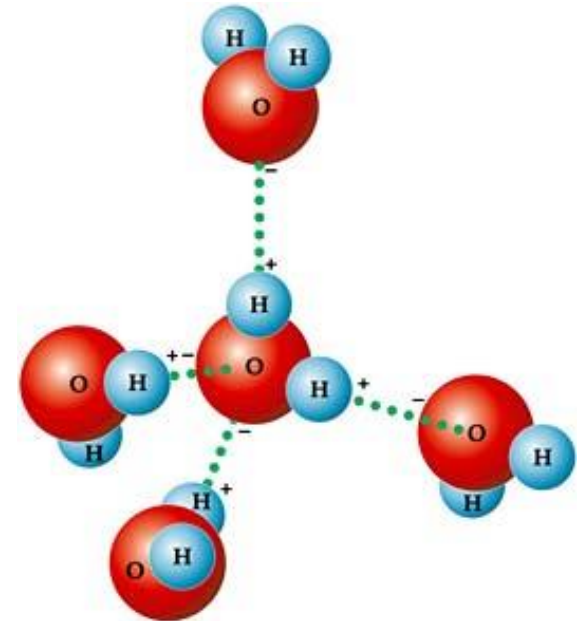
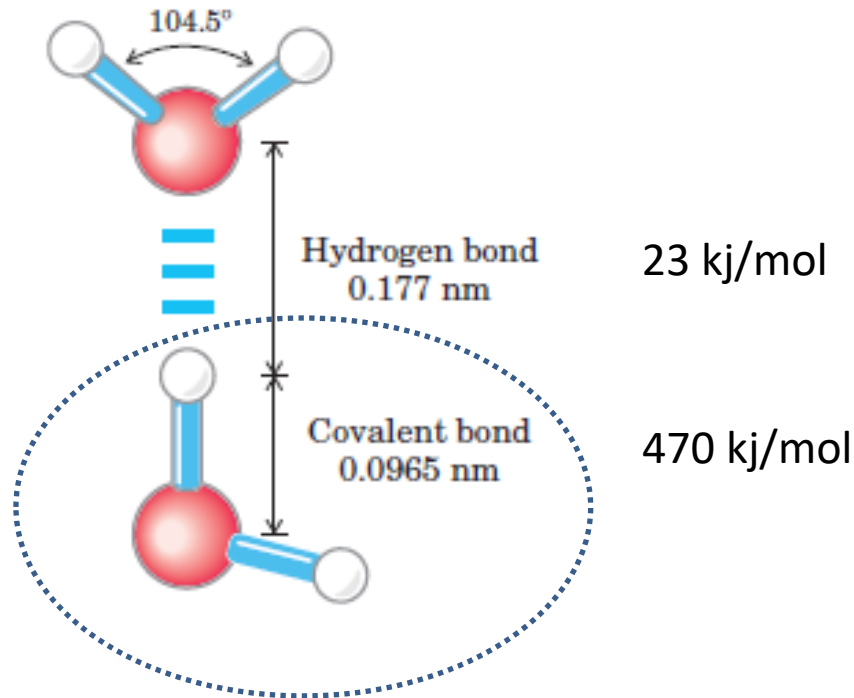
Objetivos

Compreender:

- Forças de atração entre moléculas de água
- Interação da água com os solutos
- Ionização parcial da água

A molécula da água

(b)



1 molécula interage com outras 3 ou 4 (~3,4) moléculas de água

- A água é líquida em temperatura ambiente por causa das pontes de hidrogênio que mantêm a coesão entre as moléculas
- Tem alta tensão superficial

Concentração molar da própria água pura

- Qual é a massa de 1 mol de água ?
- Qual é a concentração molar da água pura ?

1 mol de água = 18 g

1 L de água = 1000 g; portanto 1 L de água contém $1000/18$ mol de água

Há 55,5 mol de água por litro de água, ou seja: 55,5 Molar (M)
Moléculas de água **sempre serão** as mais abundantes em uma solução aquosa

Água como solvente de biomoléculas

- Entidades moleculares que têm grupos químicos polares ou estão ionizadas (tem carga elétrica) farão interação eletrostática com a água

- São solúveis em água e assim definidas como **hidrofílicas**

- Entidades moleculares apolares são hidrofóbicas (não são solúveis em água)

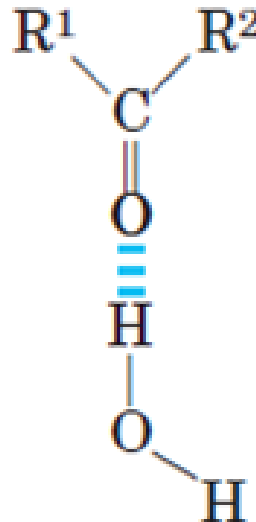
- Ex. moléculas de lipídios, cera e algumas vitaminas possuem grandes regiões apolares

Exemplos de interação água-soluto: **grupos químicos comuns nas biomoléculas são polares**

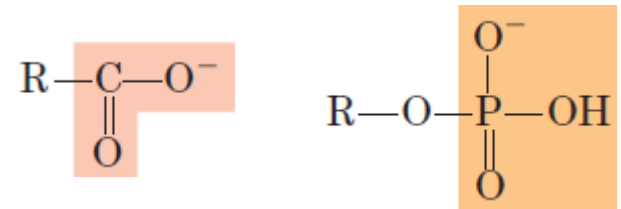
Grupo hidroxil e
água



Grupo cetona e
água



E a carboxila?
E o fosforil ?



Gases importantes para a vida são apolares e pouco solúveis na água

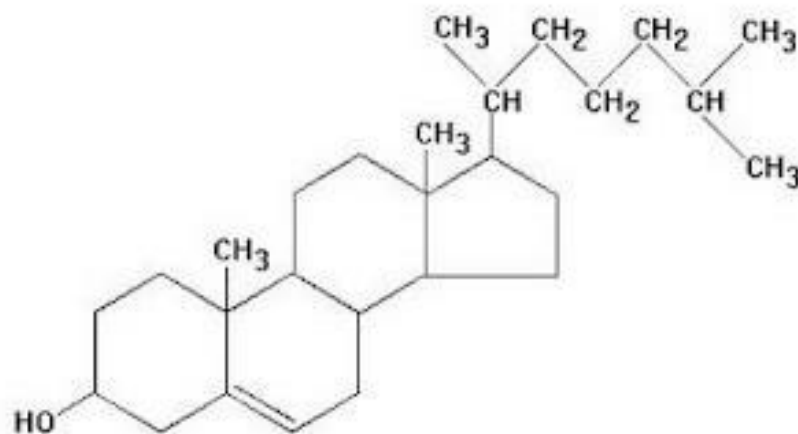
Gás	Estrutura*	Polaridade	Solubilidade em água (g/L) [†]
Nitrogênio	$\text{N}\equiv\text{N}$	Apolar	0,018 (40°C)
Oxigênio	$\text{O}=\text{O}$	Apolar	0,035 (50°C)
Dióxido de carbono	$\overset{\delta-}{\text{O}}=\text{C}=\overset{\delta-}{\text{O}}$	Apolar	0,097 (45°C)
Amônia	$\begin{array}{c} \text{H}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

Comportamento de entidades moleculares apolares na água

- Substâncias apolares, como os lipídios, possuem majoritariamente ligações covalente apolares
- Não estabelecem interação água-soluto
 - Tendem a formar partículas em água (formam suspensão)

Analisemos onde há ligações **polares** e **apolares** nesta molécula:



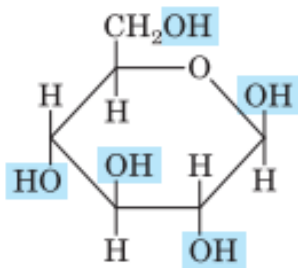
Exemplos de biomoléculas com regiões polares, apolares e com ambas

TABELA 2-2

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

Polar

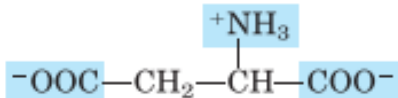
Glicose



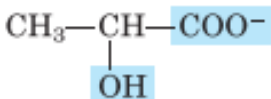
Glicina



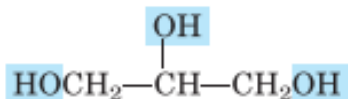
Aspartato



Lactato

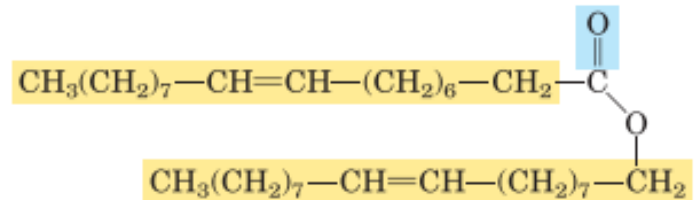


Glicerol



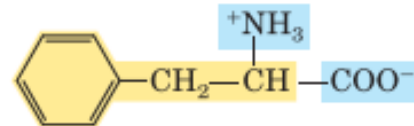
Apolar

Cera comum

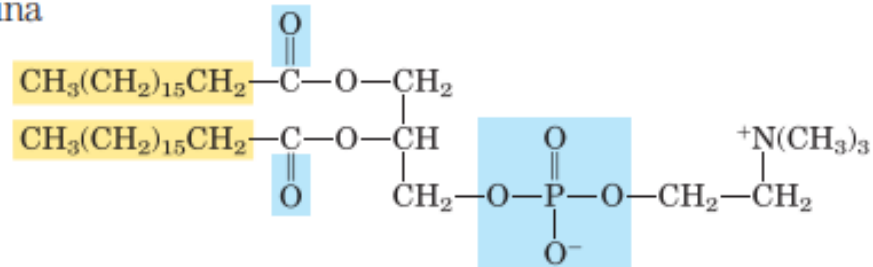


Anfipática

Fenilalamina



Fosfatidilcolina

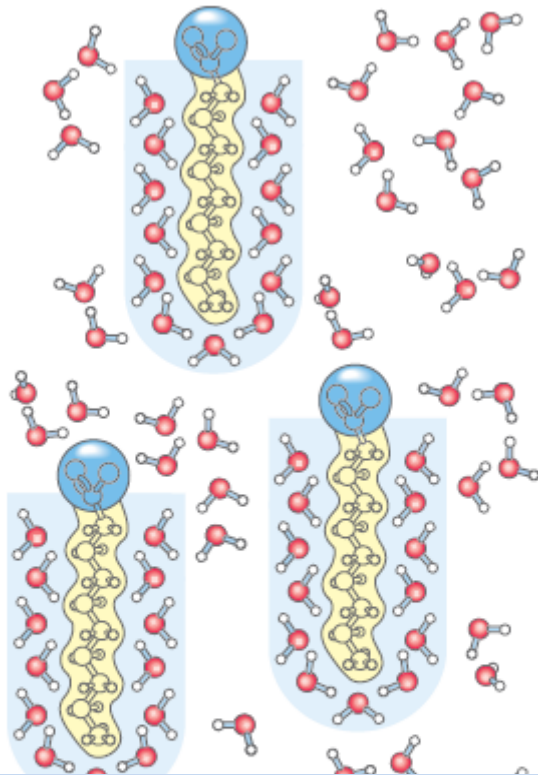


Grupos polares

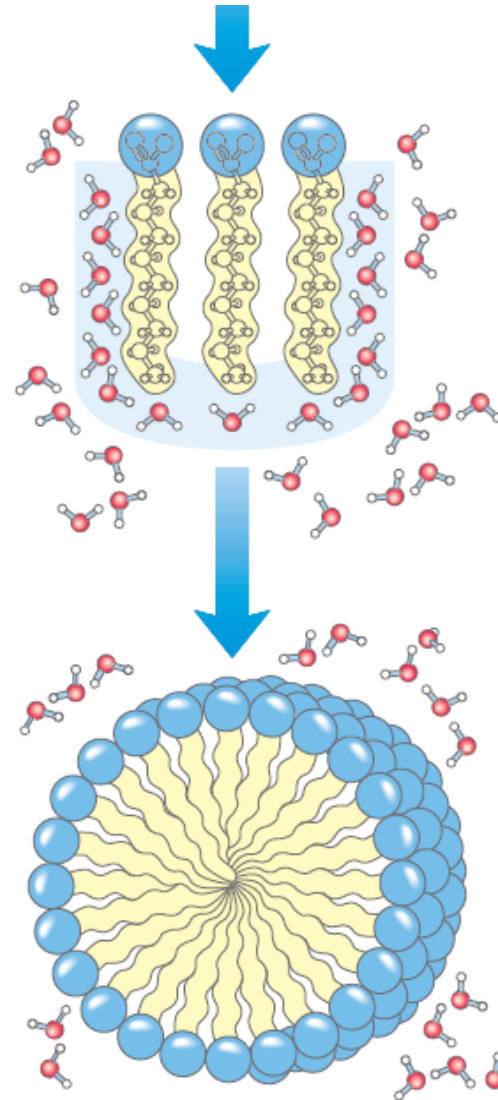


Grupos apolares

Ácidos graxos *são levemente* anfipáticos e se aglomeram em água



Se estabilizam quando estabelecerem interações hidrofóbicas entre si



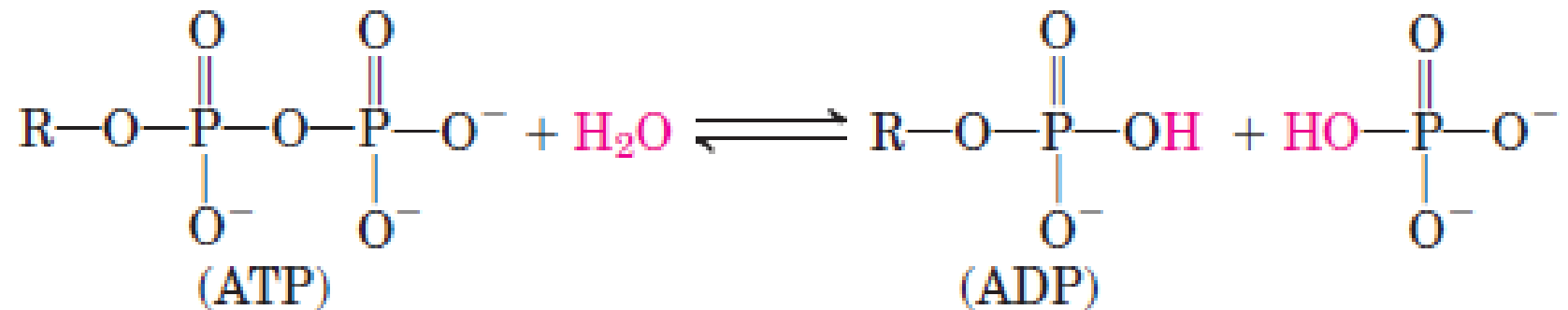
Mensagem importante

Interações hidrofóbicas e interações químicas do tipo “água-água” e “água-soluto” são fracas!

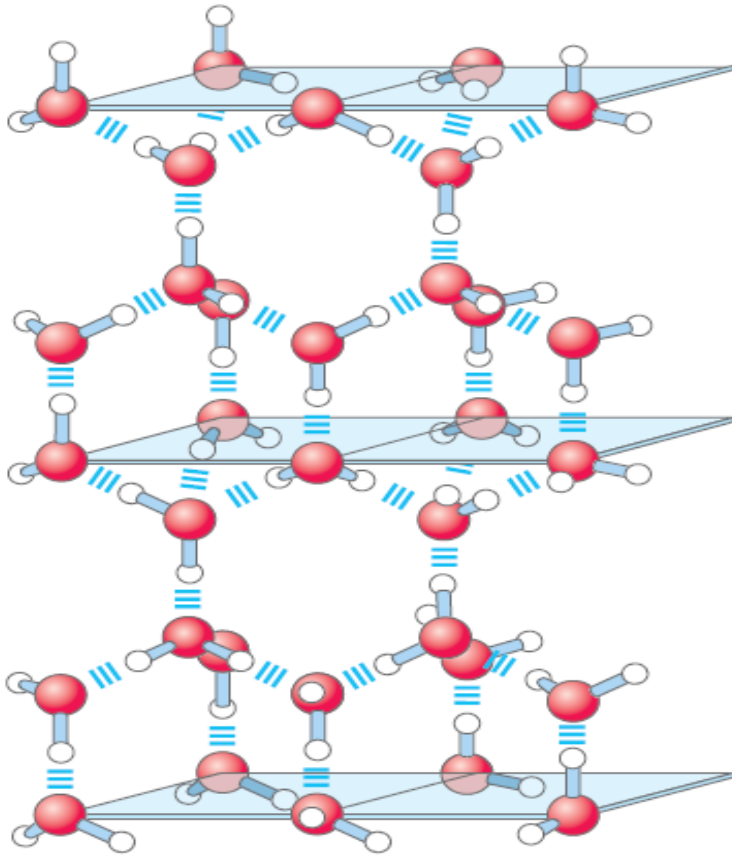
Apesar, ajudam a determinar a estrutura espacial de polissacarídeos, proteínas, DNA e membranas

Água como reagente

Reação de hidrólise

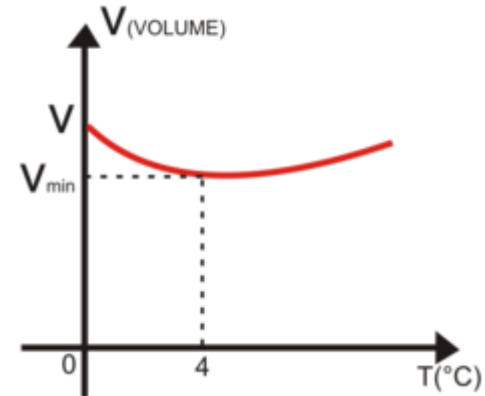


Característica anômala da água



1 molécula interage com até outras 4 moléculas de água

Determina organização cristalina e expansão do volume



Membrana da célula pode ser rompida por congelamento



Características da Água: sua Ionização

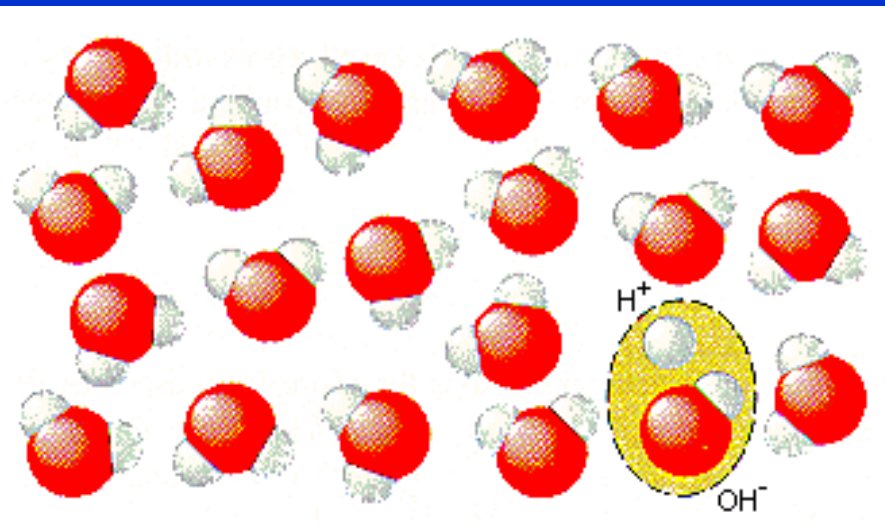
Bioquímica e Biofísica

Prof. Dr. Tiago R. Figueira

Características da Água

Segunda parte

Ionização da Água: há íons na água pura



Sinônimos de ionização

- Dissociação
- Desprotonação

Algumas moléculas de água sempre estão ionizada: “é a ionização parcial”

Na água pura há: H_2O , H^+ e OH^-



Na água pura, $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-]$. Por quê?

$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = 1 \times 10^{-7} \text{ M}$ ($0,1 \mu\text{M}$), a 25°C

Quantificação da tendência de ionização da água

- Equilíbrio da Reação
- Constante de equilíbrio (K_{eq})



$$K_{eq} = \frac{[C][D]}{[A][B]}$$

Exemplo de estimativa da concentração de íons na água (Vídeo)

Dado que:

Pressão = 1 atm

Temp. = 25 °C

$[H_2O] = 55,5 \text{ M}$

$[H^+] = [OH^-] = 1,0 \times 10^{-7} \text{ M}$



$$K_{eq} = \frac{[H^+] * [OH^-]}{[H_2O]}$$

$$K_{eq} = 1,8 \times 10^{-16} \text{ M}$$

Pensemos na água pura e em misturas aquosas



Efeito da temperatura:

- a 25 °C: $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = 1,0 \cdot 10^{-7} \text{ M}$ (100 nM)
- A 37 °C: $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = \underline{126 \text{ nM}}$

$$K_{\text{eq}} = \frac{[\text{H}^+] * [\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}]}$$

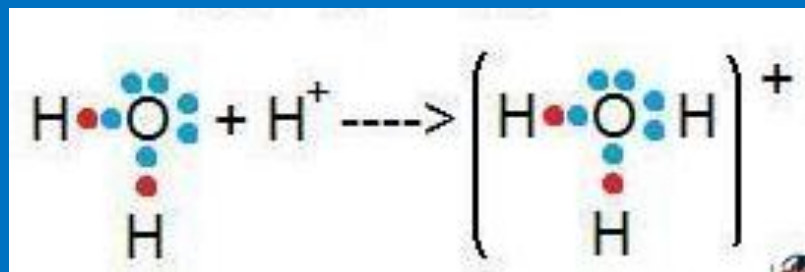
No sangue arterial a 37 °C (uma mistura):

$[\text{H}^+]$ é ~ 40 nM, mas a $[\text{OH}^-]$ tem outra concentração!
Essa concentração é maior ou menor que 40 nM? Por quê?



Nos comunicamos como se o hidrogênio ionizado (H^+) estivesse livre, mas....

O hidrônio (H_3O^+) é a espécie química formada quando o H^+ reage com a própria água



Dada a pronta reversibilidade da reação acima, na prática é válido pensar:

tanto o H^+ livre quanto o H_3O^+ representam a efetiva “disponibilidade” de H^+ no meio aquoso

Para mais discussão, consulte:

<http://chemed.chem.purdue.edu/genchem/topicreview/bp/ch11/acidbase.php>

Por convenção, usa-se uma escala logarítmica para se expressar a concentração de H^+ em soluções aquosas

pH é o logaritmo negativo da concentração molar de H^+

$$[H^+] = 1 \times 10^{-7} \text{ M}$$

$$\text{pH} = \log \frac{1}{[H^+]} = -\log [H^+]$$

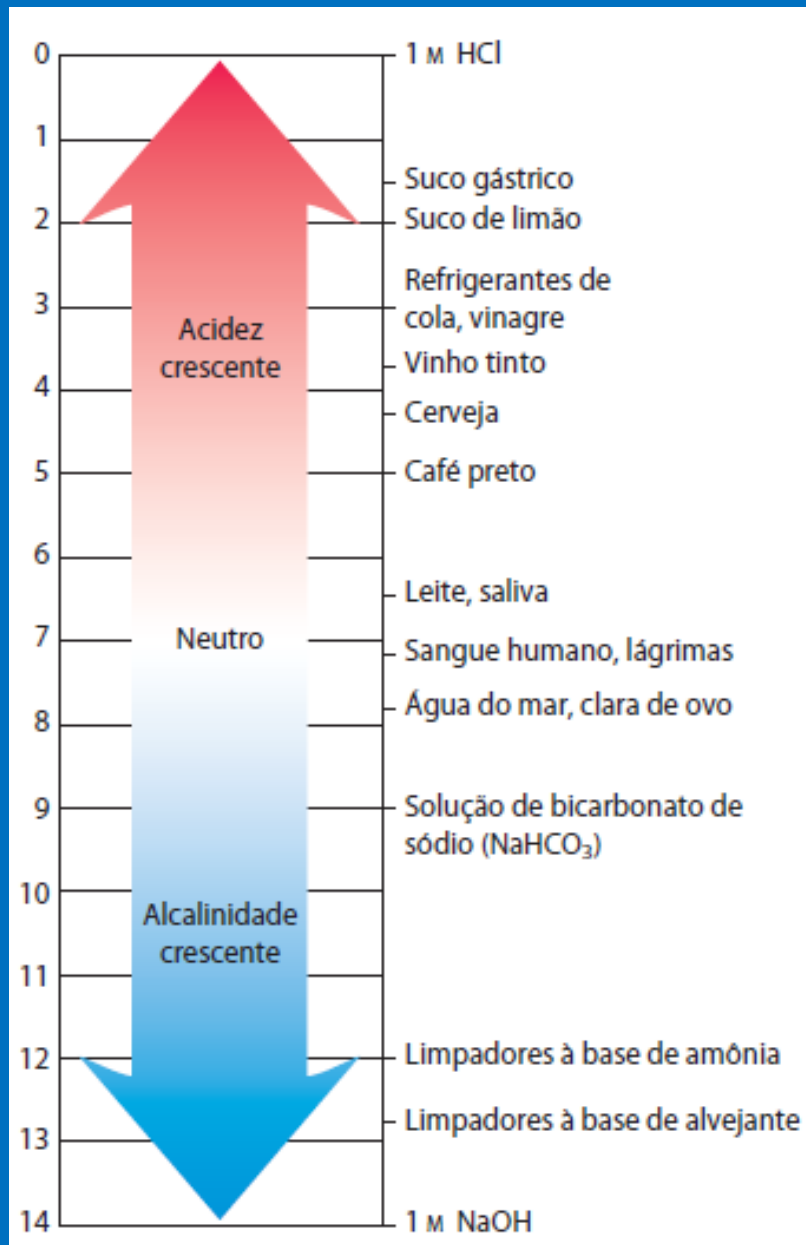


TABELA 2-6

A escala de pH

$[H^+]$ (M)	pH
$10^0(1)$	0
10^{-1}	1
10^{-2}	2
10^{-3}	3
10^{-4}	4
10^{-5}	5
10^{-6}	6
10^{-7}	7
10^{-8}	8
10^{-9}	9
10^{-10}	10
10^{-11}	11
10^{-12}	12
10^{-13}	13
10^{-14}	14

Soluções aquosas podem ter pH diferente de 7



Ácido e alcalino são adjetivos que podemos utilizar para qualificar o comportamento de substâncias e soluções

Definições “operacionais” de ácido e de base (similar as de Bronsted)

Ácido

Qualquer substância que aumenta a concentração de H^+ quando dissolvido na água.

Base

Qualquer substância que diminui a concentração de H^+ quando dissolvido na água.

Quando analisamos soluções, temos:

- Solução ácida é aquela que tende a protonar substâncias a ela adicionadas
- Solução básica é aquela que tende a desprotonar substâncias a ela adicionadas

Referência



Nelson DL; Cox MM. Princípios de Bioquímica de Lehninger - 6ª Ed, 2014

Próxima aula: Hidratação do CO_2 e a formação de íons de hidrogênio e bicarbonato