

Água

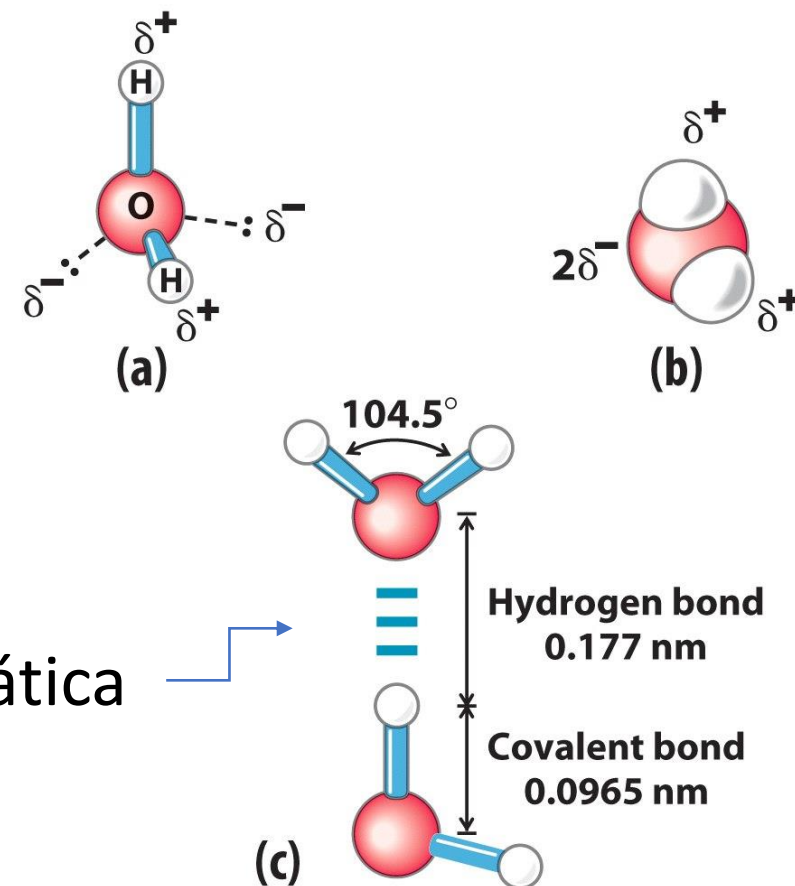
A água é o composto mais abundante na superfície do planeta e de fundamental importância para a evolução da vida, possuindo a maior participação em diversos fenômenos que ocorrem em nosso cotidiano (Stillinger, 1980). Poderíamos até pensar que a vida se traduz na forma de interações entre água e moléculas biológicas.

Como é uma molécula de água?

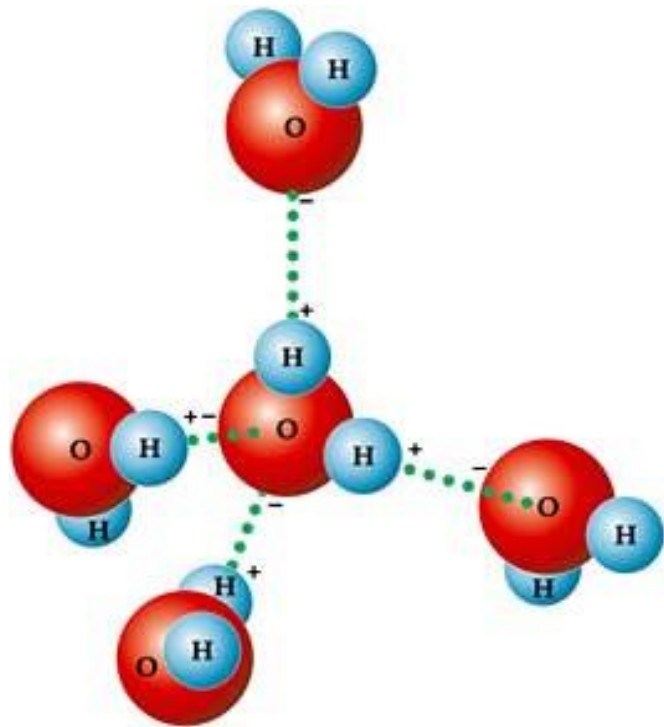
ligações hidrogênio (10 a 40 kJ/mol)
interação de van der Waals (1 kJ/mol)
ligação covalente (~500 kJ/mol)

Ligação Hidrogênio

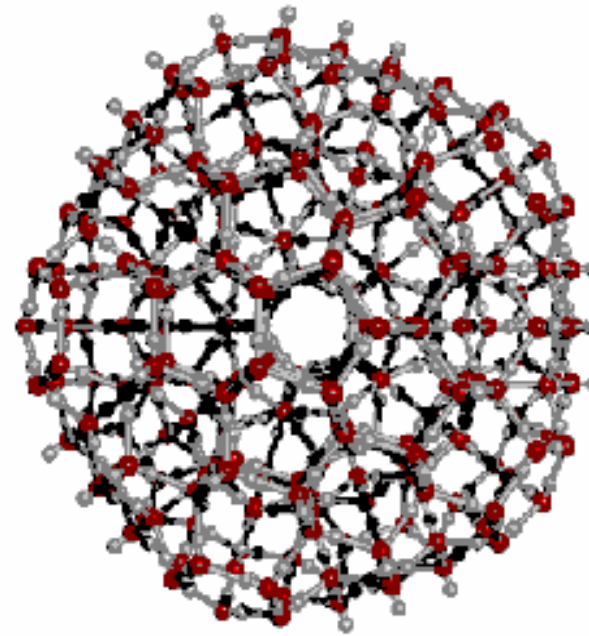
Natureza eletrostática



A água é capaz de formar até 4 ligações de hidrogênio

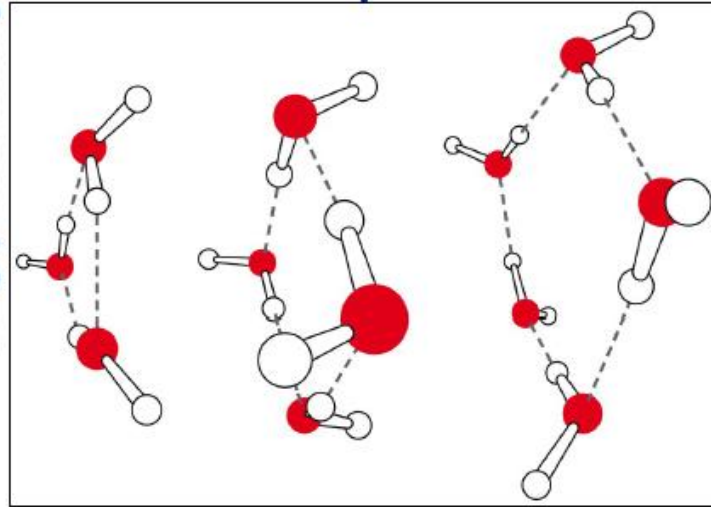


Coordenação tetraédrica de moléculas de água



“Modelo de cluster” (280 moléculas)
icosaedro (cooperativo)

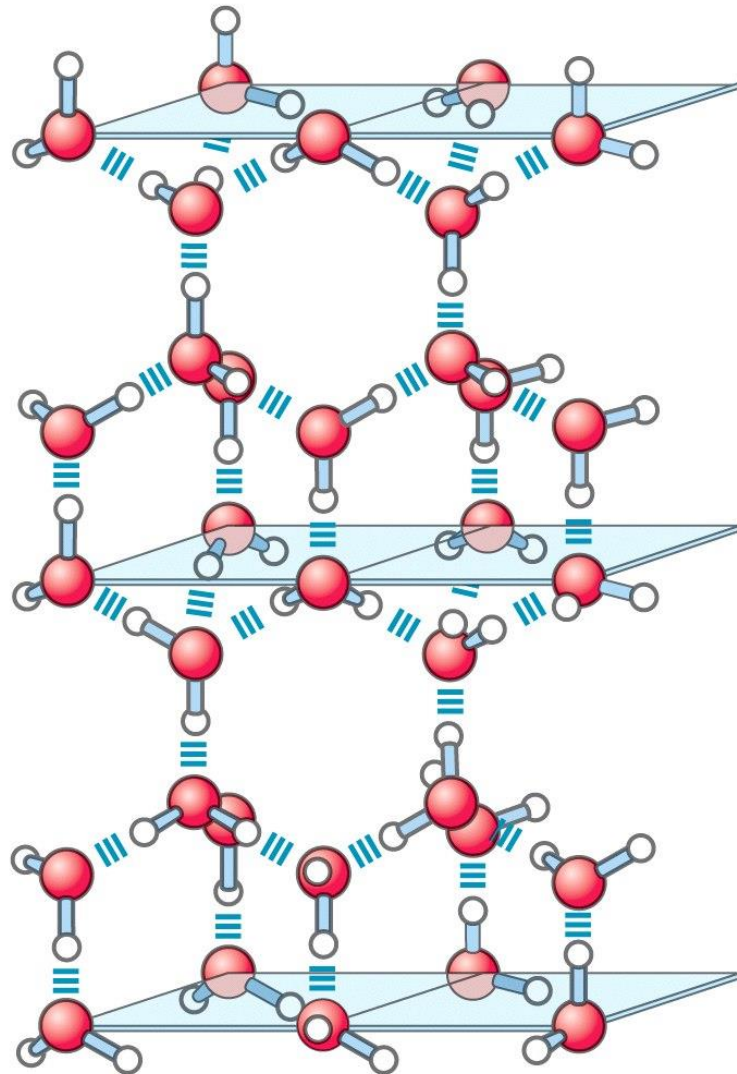
A água no estado líquido



Rede instável e tridimensional a 25 °C

Cada molécula de água forma 3 a 4 ligações de hidrogênio, mais próximas, mais coesas

A estrutura organizada da água no gelo - cristal formado por ligações de H



Por que o gelo flutua na água?

A resposta está na sua estrutura

O gelo possui 15% a mais de ligações de hidrogênio que a água

No gelo, a presença de muitas ligações de hidrogênio deixa a **estrutura expandida** e bastante porosa.

Anéis de 6 moléculas

Por que o gelo bóia na água?

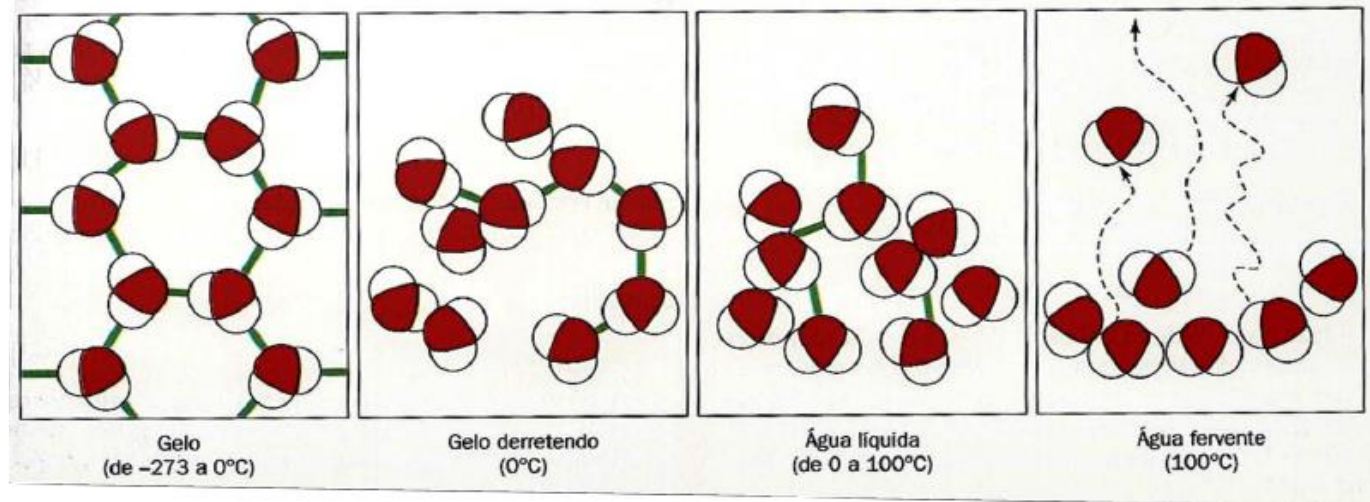
Icebergs

- $d = m/v$
- Água líquida – $d=1 \text{ g/cm}^3$
A densidade do gelo é menor que
da água = $0,92 \text{ g/cm}^3$



- Porque um copo de água com bastante gelo, ao deixar derreter o nível da água não sofre mudança perceptível?

Efeito da temperatura



Mais ligações de H são quebradas

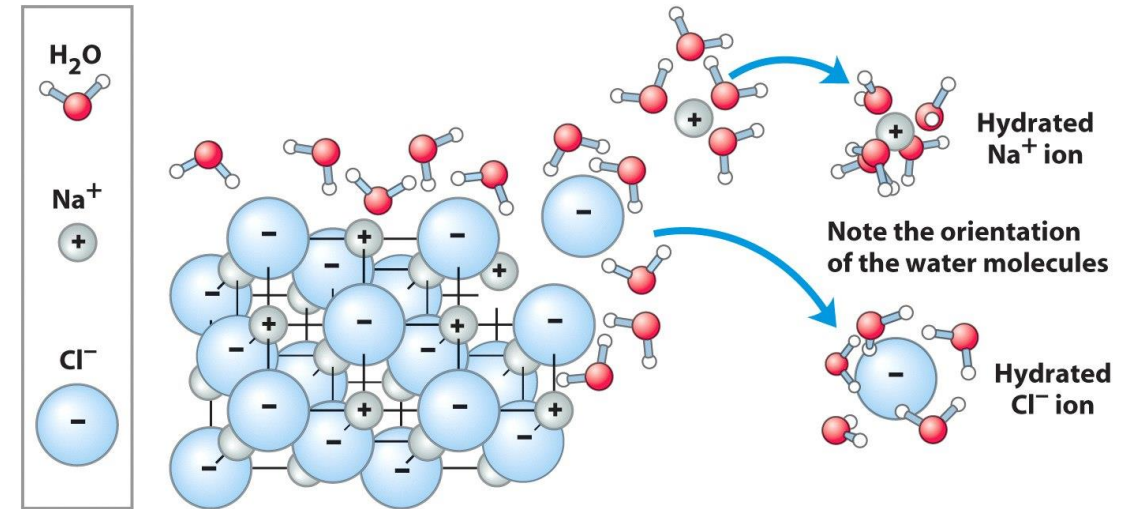
Propriedades solventes da água

Por que a água tem propriedades tão interessantes e únicas?

<u>Substância</u>	<u>PM</u>	<u>PF (°C)</u>	<u>PE (°C)</u>
Água (H ₂ O)	18,02	0	100
Amônia (NH ₃)	17,03	-77,7	-33,4
<u>Metano (CH₄)</u>	16,04	-182,5	-161,5

A água como solvente

Por que um cristal de NaCl , com ligações iônicas fortes, se dissolve em água?



Alta constantes dielétrica:

A força de atração do NaCl na água é maior que em hexano?

A resposta para a pergunta está na constante dielétrica

Constante dielétrica $F = e_1 e_2 / D r^2$

a força de atração entre dois ions é inversamente proporcional ao valor da constante dielétrica do solvente

$D_{H_2O} = 80$

$D_{\text{etanol}} = 24$

$D_{\text{hexano}} = 1,9$

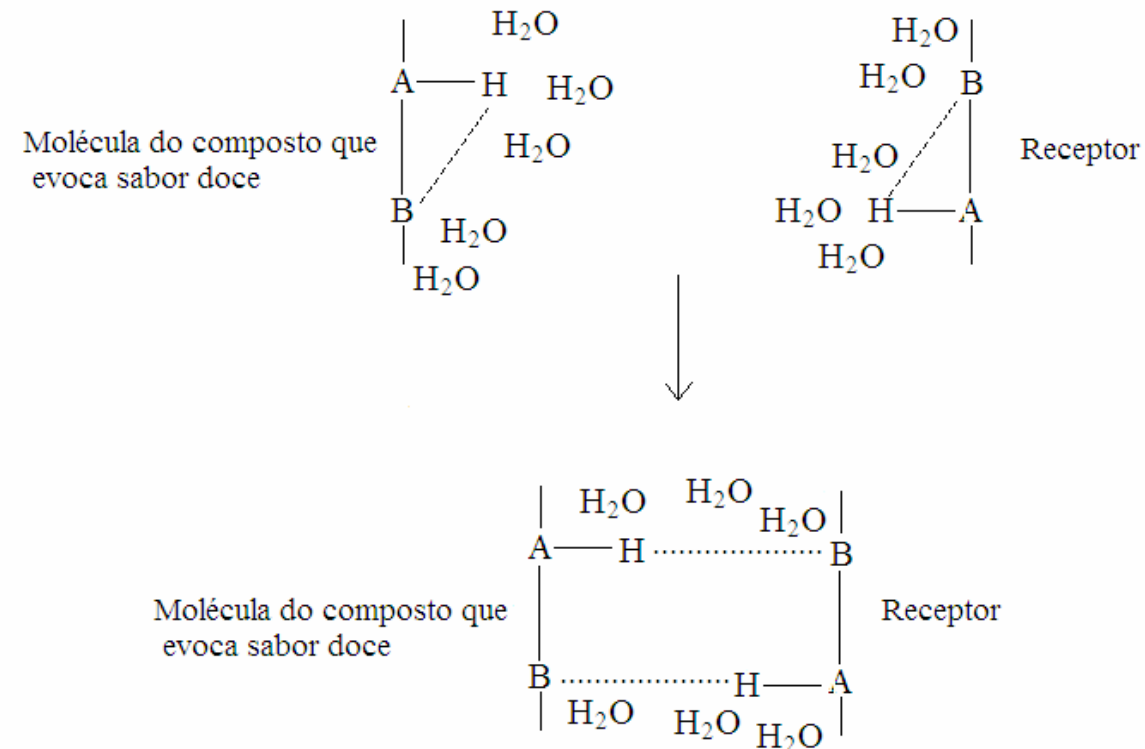
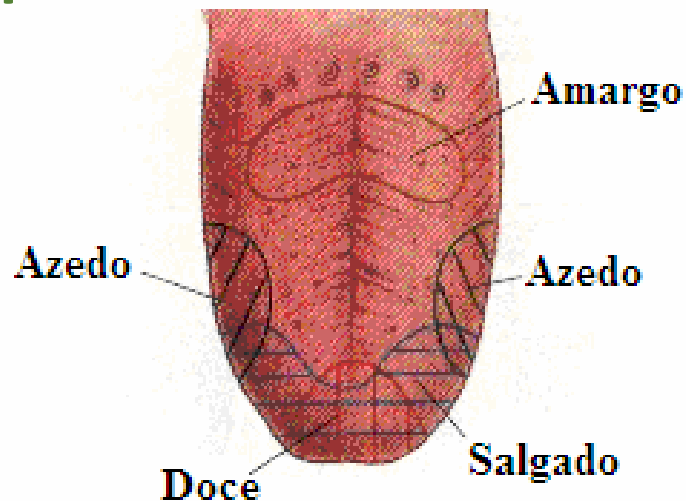
A água como solvente

solvente universal - transporte de substancias ex. sangue

- eliminação de substancias tóxicas ex. urina, suor

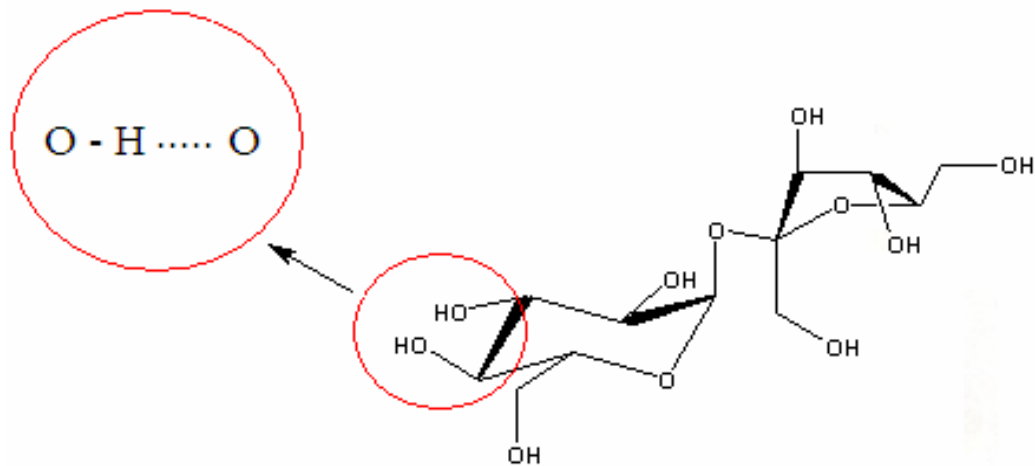
Meio para ocorrência de reações químicas

Sabor

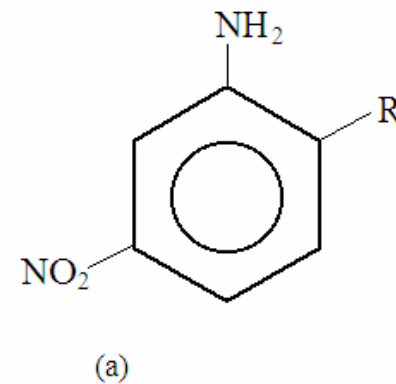


A água forma ligações de hidrogênio com solutos polares

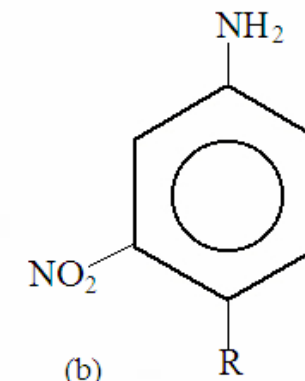
Formação de ligação de hidrogênio intramolecular entre dois sítios na molécula de sacarose



Sacarose



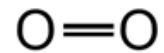
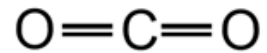
(a)



(b)

Nitroanilina (a) – doce

Os gases se dissolvem em água?



Gás	Polaridade	Solubilidade (g/l)
Nitrogênio (N ₂)	Não polar	0,018 (40°C)
Oxigênio (O ₂)	Não polar	0,035 (50°C)
Gás carbônico (CO ₂)	Não polar	0,97 (45°C)
Amônia (NH ₃)	Polar	900 (10°C)
Gás sulfídrico (H ₂ S)	Polar	1860 (40°C)

Ex. Hb no sangue e Mb no tecido

Fonte: DL, Nelson e MM, Cox, .
Lehninger Principles of Biochemistry, New York: Worth Publishers, 2000. p. 88.

Algumas ligações de hidrogênio de importancia biológica

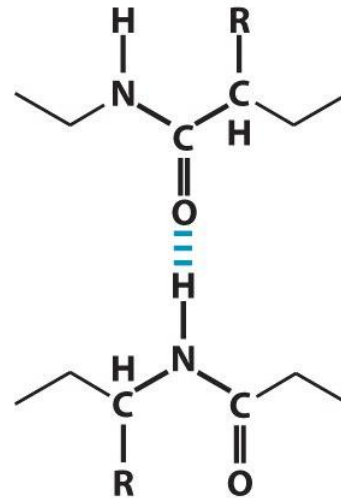
Between the hydroxyl group of an alcohol and water



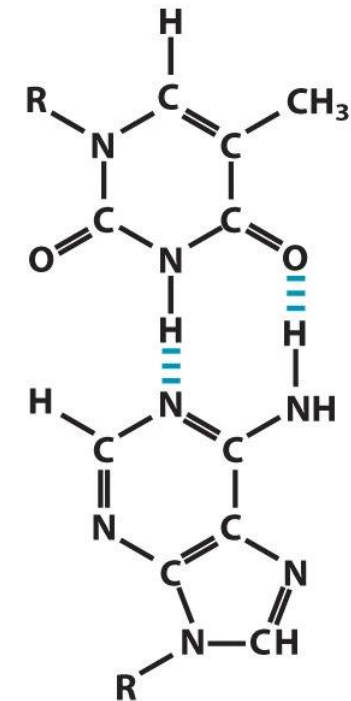
Between the carbonyl group of a ketone and water



Between peptide groups in polypeptides



Between complementary bases of DNA



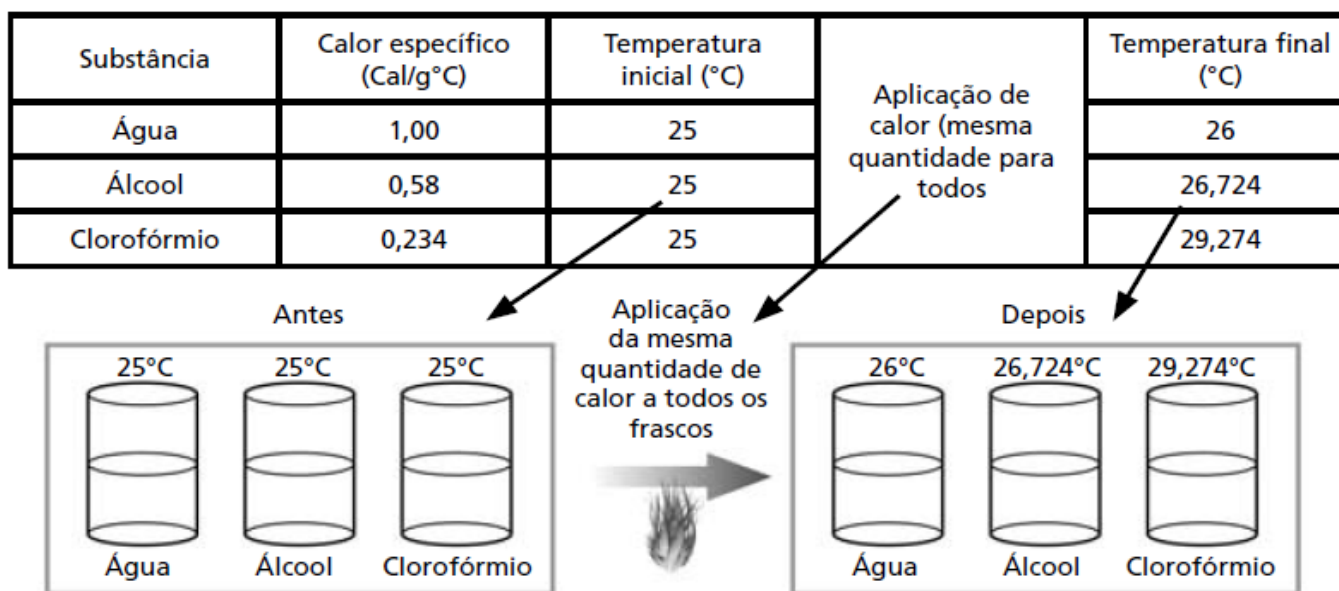
Thymine

Adenine

Por que o DNA possui a forma helicoidal?

Propriedades da água

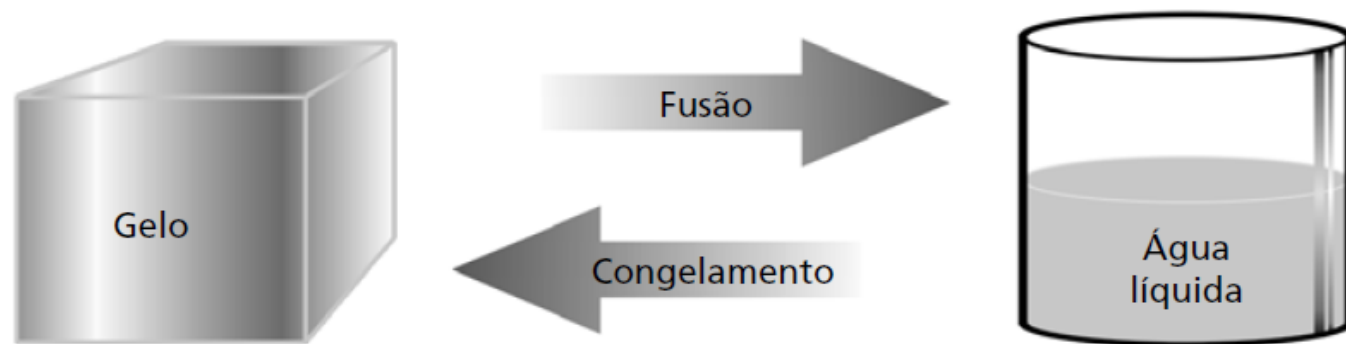
- **Alto calor específico** - mantém a temperatura constante,
- é preciso muito calor 1 cal/g) para elevar 1 °C a temperatura da água



A água é um excelente moderador de temperatura

- 1) regula a temperatura do corpo
- 2) regula a temperatura ambiente (clima)

Altos pontos de fusão e de congelamento



Alto calor de vaporização – a água não evapora com facilidade 540 cal/g)

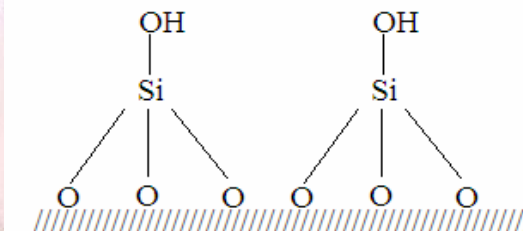
	Ponto de fusão (°C)	Ponto de ebulição (°C)	Calor de vaporização (cal/g)
Água	0	100	2260
Metanol (CH ₃ OH)	-98	65	1100
Etanol (CH ₃ CH ₂ OH)	-117	78	854
Propanol (CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH)	-127	97	687
Butanol (CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₂ OH)	-90	117	590
Acetona (CH ₃ COCH ₃)	-95	56	523
Hexano (CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃)	-98	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

Fonte: D.L., Nelson e M.M., Cox (2000).
Lehninger, *Principles of Biochemistry*, Worth Publishers, NY.

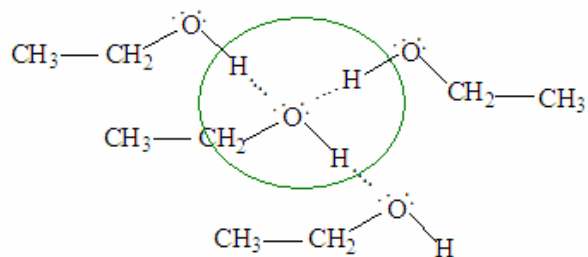
Como o suor refresca?

- Por que ao se colocar algumas gotas de água sobre uma placa de vidro, essas não se espalham pela superfície e já com algumas gotas de álcool, este se espalha pela placa?

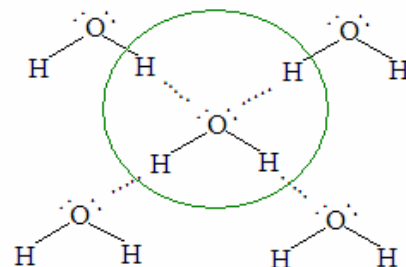
Lágrimas do vinho



Como o líquido pode “escorrer”,
ascender na parede interna do recipiente?



(a)

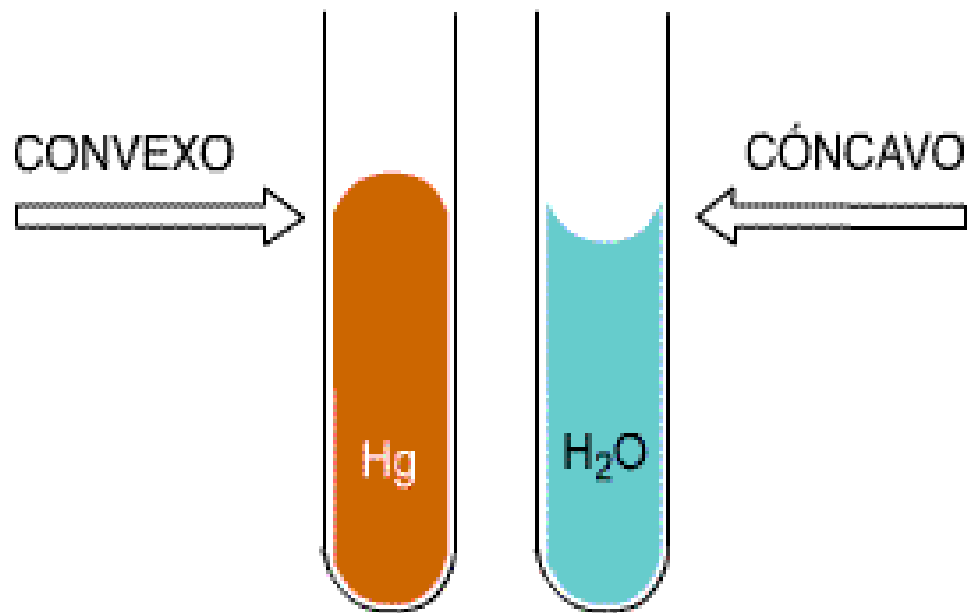


(b)

Forças de coesão e adesão

água-água, álcool-álcool, água-álcool, água-vidro (silanóis) e
álcool-vidro

Formação do menisco para o mercúrio (Hg) e para a água líquida



Forças de coesão e adesão

Como se forma uma gota?

- Que propriedade tem a água para que pequenos pingos de água formem gotas esféricas?
- Agulha e Insetos - boiam na água

E em superfícies bastante poluídas?

Na presença de Tensoativos? Aumento de temperatura?

Consequência no fenômeno da capilaridade

Tensão superficial -a água forma uma extensa rede de ligações de hidrogênio que lhe confere grande tensão superficial

Água – 72,75 mN/m

Álcool – 22,55 mN/m

Mercúrio -465 mN/m

Efeito hidrofóbico da água

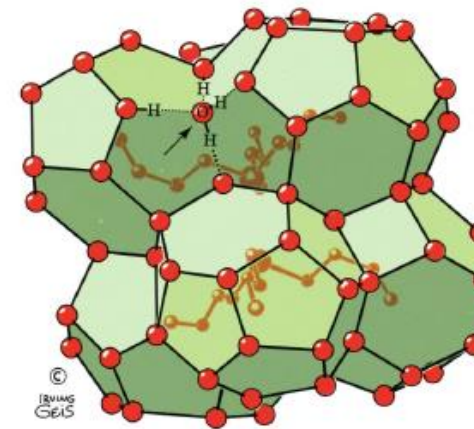
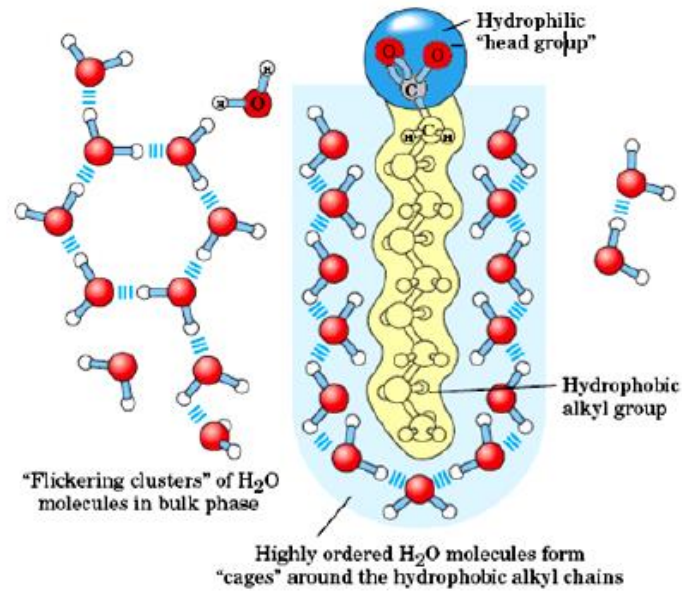


Figure 8-69
Illustration: Irving Gels. Image from the Irving Gels Collection, Howard Hughes Medical Institute. Reprinted with permission.

uma perturbação da rede de água → Organização
alto custo entrópico ($\Delta S < 0$)

3 tipos de agregados lipídicos em meio aquoso

Micelas:

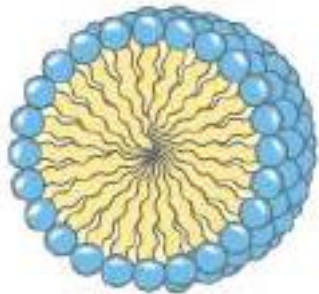
Estruturas esféricas;

Regiões hidrofóbicas $\Rightarrow$ porção interna

Ex.: Ác. Graxos



Unidades individuais têm a forma de cunha (seção transversal da cabeça maior do que a da cadeia lateral)



(a) Micela

Bicamada:

2 camadas monolipídicas $\Rightarrow$

lâmina bidimensional

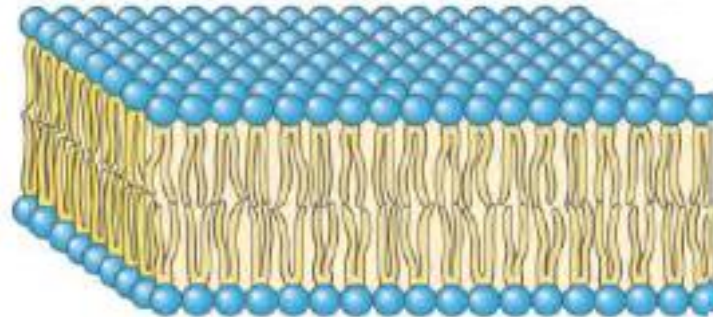
$\rightarrow$ Bordas das regiões hidrofóbicas

em contato com a $H_2O \Rightarrow$

instabilidade



Unidades individuais são cilíndricas (seção transversal da cabeça e da cadeia lateral são iguais)



(b) Bicamada

Vesículas:

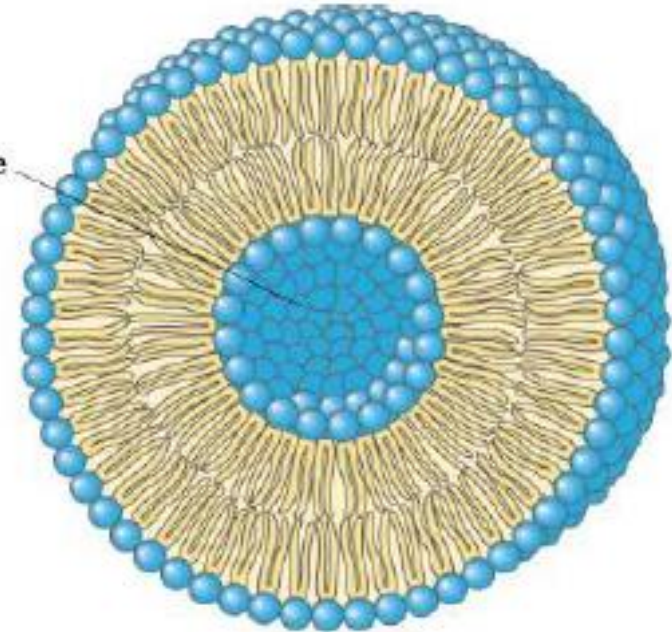
Elimina exposição de regiões

hidrofóbicas a H_2O ;

Compartimento interno aquoso

Precursos 1ª célula $\approx$ vesícula

Cavidade aquosa



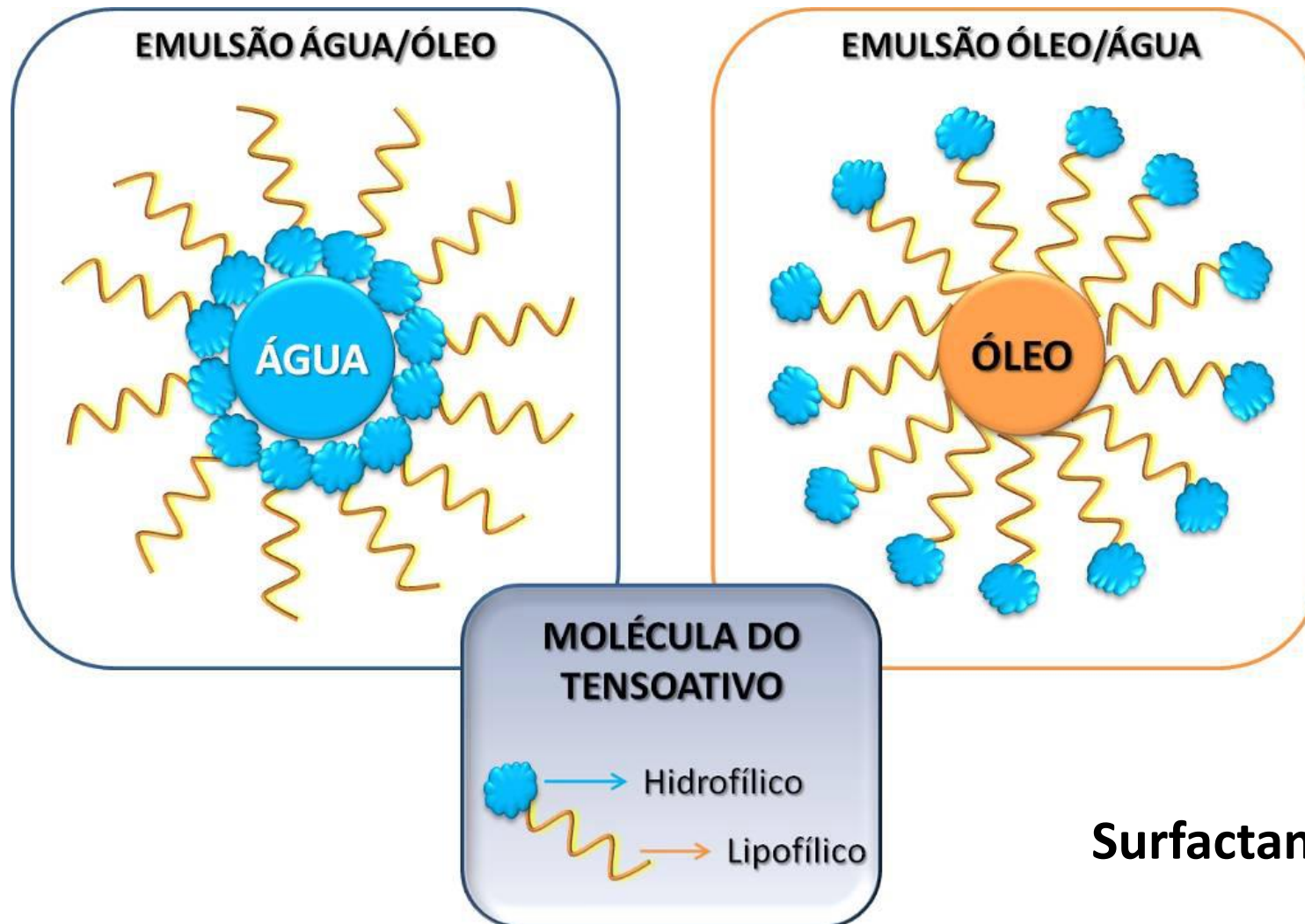
(c) Vesícula

Emulsificantes

Surfactantes – surface active agent

Xampu – ação de limpeza

Corona vírus não resiste ao sabão



Xampu
cremes

menor custo, pois o principal componente da fórmula é a água;

melhor aparência e facilidade de remoção com água

maior hidratação do extrato córneo da pele

Surfactante anionico

Exemplo de formulação de um xampu de limpeza profunda. /

<i>Ingredientes</i>	Porcentagem (%)
<i>Sodium laureth sulfate</i>	8
<i>Sodium lauryl sulfate</i>	7
<i>Cocamide MEA</i>	2
<i>Cocamidopropyl betaine</i>	2
<i>Glycerin</i>	1
<i>Fragrance</i>	0,7
<i>Citric acid</i>	To desired pH
<i>Sodium citrate</i>	0,2
<i>Sodium chlroride</i>	To desired viscosity
<i>Colors</i>	To desired color
<i>Sodium Benzoate</i>	As needed
<i>Tetrasodium EDTA</i>	As needed
<i>Preservative (Kathon CG)</i>	As needed
<i>Water</i>	q. s. to 100%

Ingredientes de um condicionador simples

. Ingredientes	Porcentagem (%)
Centrimonium chloride	1
Cetyl alcohol	2,5
Thickening gum (hydroxy ethyl cellulose)	0,5
Fragrância	0,2
Conservante	0,5
Água Completa-se para	100%

Xampu x poluição ambiental