

Universidade Federal do Ceará

Centro de Ciências

Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular

Disciplina de Biofísica

Água e Soluções Biológicas

1. Introdução
2. A estrutura da molécula de água
 - 2.1. Pontes de Hidrogênio entre as moléculas de água
 - 2.2. Pontes de Hidrogênio entre a água e outros solutos
 - 2.3. Propriedades da Água
 - 2.4. A água como solvente
3. Soluções
 - 3.1. Formas de Expressar a Concentração de uma Solução
 - 3.2. Soluções Saturadas e Não-saturadas
 - 3.3. Osmolaridade
 - 3.4. Comparação de Soluções
 - 3.5. Força Iônica

Água e Soluções Biológicas

1. Introdução

- Água → Substância mais abundante nos seres vivos
- Toda a evolução biológica foi baseada nas características químicas e físicas da molécula de água;
 - Meio onde todas as reações biológicas e bioquímicas ocorrem;
 - Estrutura com propriedades únicas.
- Os primeiros organismos vivos se originaram na água.

2. A Estrutura da Molécula da Água

- 2 átomos de hidrogênio e um átomo de oxigênio;
- Cada átomo de hidrogênio em uma molécula de água compartilha um par de elétrons com um átomo de oxigênio;
- A geometria da molécula é definida pela forma dos orbitais eletrônicos externos do átomo de oxigênio;
- Estes orbitais formam o vértice de um tetraedro bruto → Átomos de hidrogênio em 2 vértices e os elétrons não emparelhados nos outros 2;
- O ângulo H – O – H → $104,5^\circ$
 - Os orbitais não ligantes do átomo de oxigênio comprimem os orbitais compartilhados pelo hidrogênio.
- O núcleo de oxigênio atrai elétrons mais fortemente do que o núcleo do átomo de hidrogênio → Átomo de O é mais eletronegativo
 - Compartilhamento desigual dos elétrons: eles tendem a ficar na vizinhança do átomo de oxigênio;
 - Formação de 2 dipolos elétricos ao longo de cada uma das ligações H – O;
 - O → (δ^-) e H → (δ^+) .

2.1. Pontes de Hidrogênio entre as Moléculas de Água

- Atração eletrostática resultante entre o átomo de oxigênio de uma molécula de água e o átomo de hidrogênio de outra molécula;
- Ligações mais fracas do que as ligações covalentes;
- Energias:
 - Ligação Covalente → 460 KJ/mol;
 - Ponte de Hidrogênio → 20 KJ/mol.
- Cada molécula de água faz pontes de hidrogênio com outras 3.4 moléculas de água na água líquida na temperatura ambiente;
- As pontes de hidrogênio entre as diferentes moléculas de água no estado líquido não são fixas e estão sendo constantemente formadas e destruídas;
- Na água no estado sólido, a molécula de água está fixa no espaço e forma pontes de H com 4 outras moléculas, dando origem a uma estrutura entrelaçada;
- Em consequência de sua estrutura aberta, a água é uma das poucas substâncias que se expande sob o congelamento, possuindo uma menor densidade do que o estado líquido.
- Fusão ou Evaporação:
 - Do estado mais organizado para um estado menos organizado

2.2. Pontes de Hidrogênio entre a água e outros solutos

- As pontes de H podem ser formadas entre um átomo eletronegativo (oxigênio e nitrogênio) e um átomo de hidrogênio ligado covalentemente a outro átomo eletronegativo;
- Moléculas polares não-carregadas são rapidamente dissolvidas na água por causa do efeito estabilizante das muitas pontes de H que são formadas entre o soluto e o solvente.

2.3. Propriedades da Água

- A partir de suas propriedades macroscópicas, a H₂O favoreceu os sistemas biológicos de diversas maneiras;
- Densidade:
 - A H₂O em estado sólido possui uma menor densidade do que em estado líquido;
 - Camada de gelo superficial no inverno em lagos e oceanos.
- Calor Específico:
 - Quantidade de energia térmica que deve ser fornecida a uma substância para elevar sua temperatura;
 - Para resfriar a água é necessário retirar mais calor;
 - Moderador térmico nos seres vivos.
- Calor de Vaporização:
 - Precisa de uma grande quantidade de energia para passar isotermicamente de líquido a vapor;
 - Controle da temperatura corporal.
- Tensão superficial:
 - Uma espécie de "superfície" mantida por atrações intermoleculares que tendem a manter coesas as moléculas de um líquido, com atração para o centro das moléculas das camadas mais externas;
 - Propriedade que facilitou a compartimentalização dos seres vivos.
- Viscosidade:
 - A água apresenta uma viscosidade muito baixa, apesar do grande número de pontes de H formadas → Caráter temporário das pontes de hidrogênio.

2.4. A água como solvente

- “Solvente Universal”
- Substâncias hidrofílicas e hidrofóbicas;
- Interação eletrostática da Água com solutos carregados;
- Compostos anfipáticos:
 - Micelas.

3. Soluções

- Conceito de Solução:
 - Mistura unifásica de mais de um componente. Possui um componente dispersor, chamado solvente, e um componente disperso chamado soluto.
- Solução Aquosa:
 - É aquela no qual o solvente é a água, que é o solvente natural nos sistemas biológicos

3.1. Formas de Expressar a Concentração de uma Solução

- Concentração de uma solução:
 - É a relação entre soluto/solvente ou soluto/solução. É uma forma de expressar a quantidade de soluto em uma determinada quantidade de solução.
- Principais Formas de se Expressar a concentração de soluções:

Percentual (%):

- Gramas de soluto por 100 mL de solução → % (m/v)
- mL de soluto em 100 mL de solução → % (v/v)

Molaridade (M):

- Número de moles de soluto por L de solução;
- Forma mais comum de se expressar a concentração de uma substância;

$$M = \frac{m_{(g)}}{PM \cdot V_{(L)}}$$

Onde: M → Molaridade

$m_{(g)}$ → Massa do soluto em gramas

$V_{(L)}$ → Volume em litros da solução

PM → Peso Molecular do Solute

Molalidade (m):

- Número de moles de soluto por 1000 gramas de solvente;
- Medida mais precisa do que a molaridade, pois ambos solutos e solventes são pesados;

$$m = \frac{m_{(g)}}{PM \cdot V_{(kg)}}$$

Onde: m → Molalidade

$m_{(g)}$ → Massa do soluto em gramas

$V_{(L)}$ → Peso do solvente em kg (1000g)

PM → Peso Molecular do Solute

Normalidade (N):

- Número de equivalentes-gramas (Eq-g) do soluto por litro de solução;
- Útil para soluções de ácidos e bases;
- Um Eq-g de um ácido é a quantidade de ácido que pode doar 1 mol de íons H^+ para uma base;
- Um Eq-g de uma base é o total que pode aceitar 1 mol de H^+ ;
- Ácidos Monopróticos (Fornecer 1 mol de H^+) → Eq-g é igual ao Peso Molecular

- Ácidos Dipróticos (Fornece 2 moles de H⁺) → Eq-g é metade do Peso molecular

Partes por milhão (p.p.m):

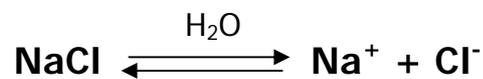
- Corresponde a 1 mg de soluto em 1 litro de solução

3.2. Soluções Saturadas e Não-saturadas

- Cada soluto possui um limite de solubilidade em um determinado solvente;
- Solução Não-Saturada → Limite de solubilidade ainda não alcançado
- Solução Saturada → Limite de solubilidade alcançado

3.3. Osmolaridade

- Muitas moléculas ao se dissolverem, são separadas em suas partículas constituintes, pela ação do solvente:



- Geralmente, as partículas separadas possuem carga elétrica, e por isso se denominam eletrólitos;
- Uma consequência direta da hidrólise é que a concentração de partículas é maior do que a concentração de moléculas;
- A unidade de concentração de partículas é a osmolaridade (Osmol, osm), que comporta duas definições:
- Conceito estrutural: 1 osmol corresponde a $6,02 \times 10^{23}$ partículas por litro de solução.
- Conceito operacional: 1 osmol é o número de partículas que exerce pressão de 22,4 atmosferas em volume de 1 litro, ou pressão de 1 atmosfera em volume de 22,4 litros.

- A concentração osmolar é igual à concentração Molar (Molaridade) multiplicada pelo número de partículas: $C_{osm} = M \times n$.
- Solutos Múltiplos;
- Solutos que não se dissociam completamente:
 - Coeficiente de dissociação (α)

$$C_{osm} = C_M + C_M \cdot \alpha(n-1)$$

3.4. Comparação de Soluções

- Pode-se considerar a quantidade de soluto em uma solução como:

$$Q = C \cdot V$$

Onde: Q → Quantidade de Solute

C → Concentração (qualquer unidade)

V → Volume de Solução (qualquer unidade)

- Solução 1: $Q = C_1 \cdot V_1$
- Solução 2: $Q = C_2 \cdot V_2$
- $C_1 \cdot V_1 = C_2 \cdot V_2$
- Relação útil para cálculos de diluição de soluções.

2.5. Força Iônica

- Soluções de Polieletrólitos (vários solutos ionizados)
- As cargas elétricas geram forças de atração e repulsão entre si, modificando a concentração efetiva de íons;
- Para expressar a influência da carga elétrica na concentração, Lewis e Randall propuseram o conceito de Força Iônica (μ):

$$\mu = \frac{1}{2} \sum (M \cdot z^2)$$

Onde: m → Molaridade de Cada íon

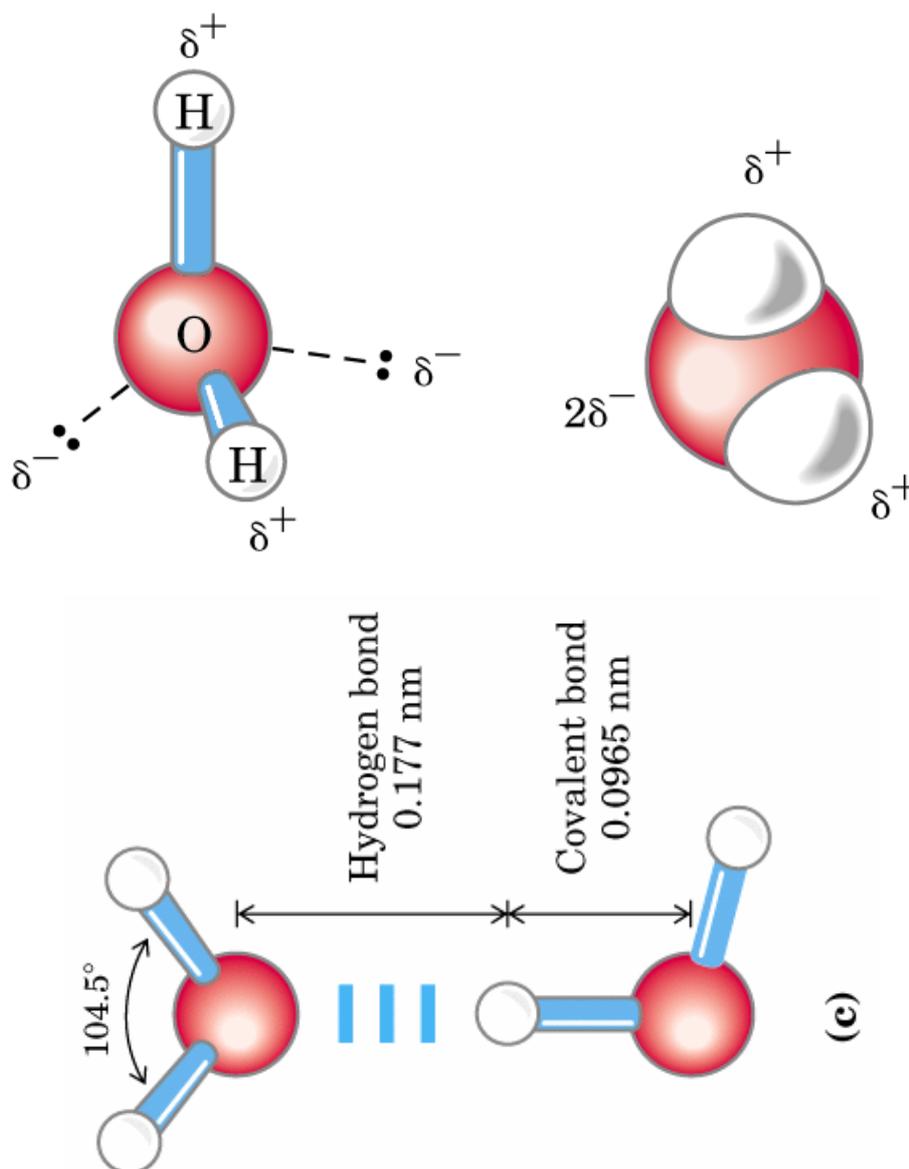
z → Valência de cada íon

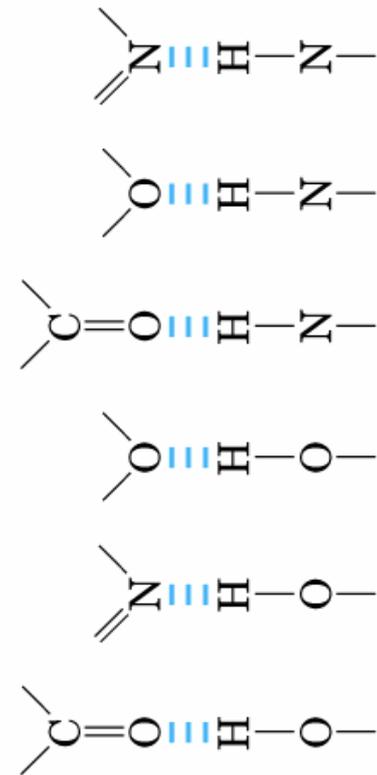
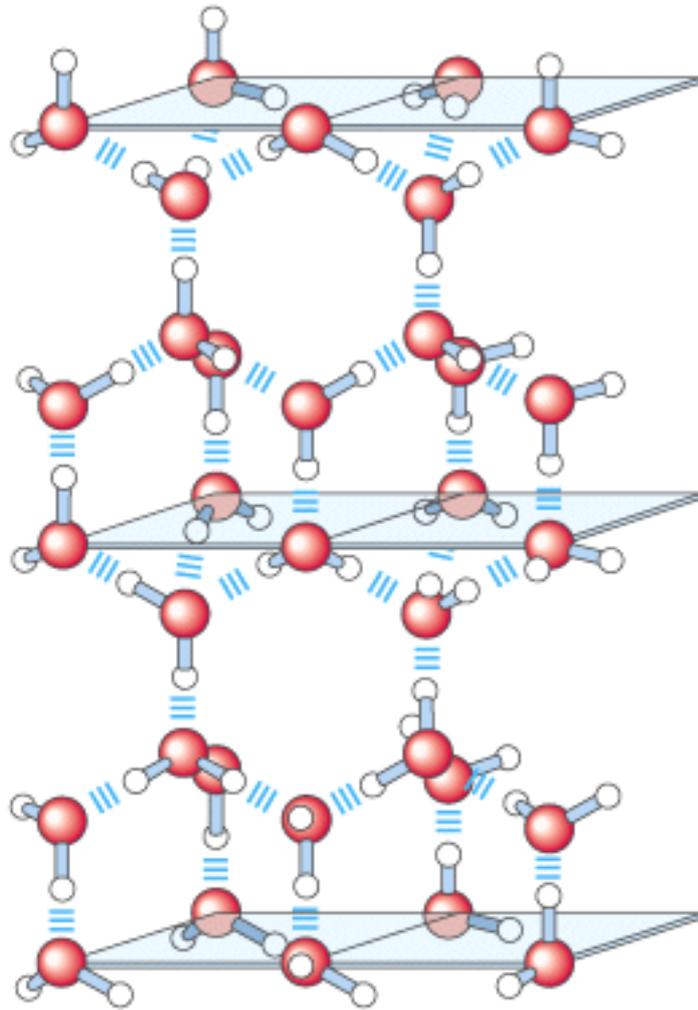
table 4-1

Melting Point, Boiling Point, and Heat of Vaporization of Some Common Solvents

	Melting point (°C)	Boiling point (°C)	Heat of vaporization (J/g)*
Water	0	100	2,260
Methanol (CH ₃ OH)	-98	65	1,100
Ethanol (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
Acetone (CH ₃ COCH ₃)	-95	56	523
Hexane (CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃)	-98	69	423
Benzene (C ₆ H ₆)	6	80	394
Butane (CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃)	-135	-0.5	381
Chloroform (CHCl ₃)	-63	61	247

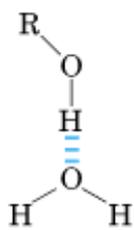
*The heat energy required to convert 1.0 g of a liquid at its boiling point, at atmospheric pressure, into its gaseous state at the same temperature. It is a direct measure of the energy required to overcome attractive forces between molecules in the liquid phase.



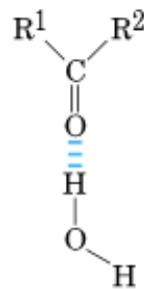


Hydrogen acceptor
Hydrogen donor

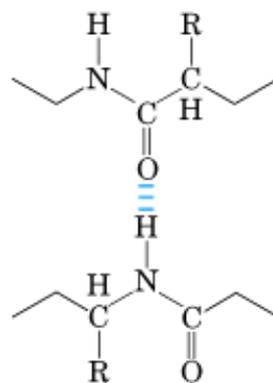
Between the hydroxyl group of an alcohol and water



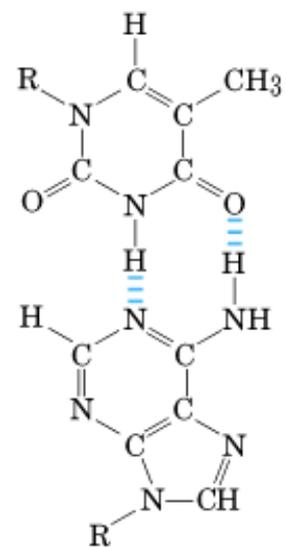
Between the carbonyl group of a ketone and water



Between peptide groups in polypeptides



Between complementary bases of DNA



Thymine

Adenine

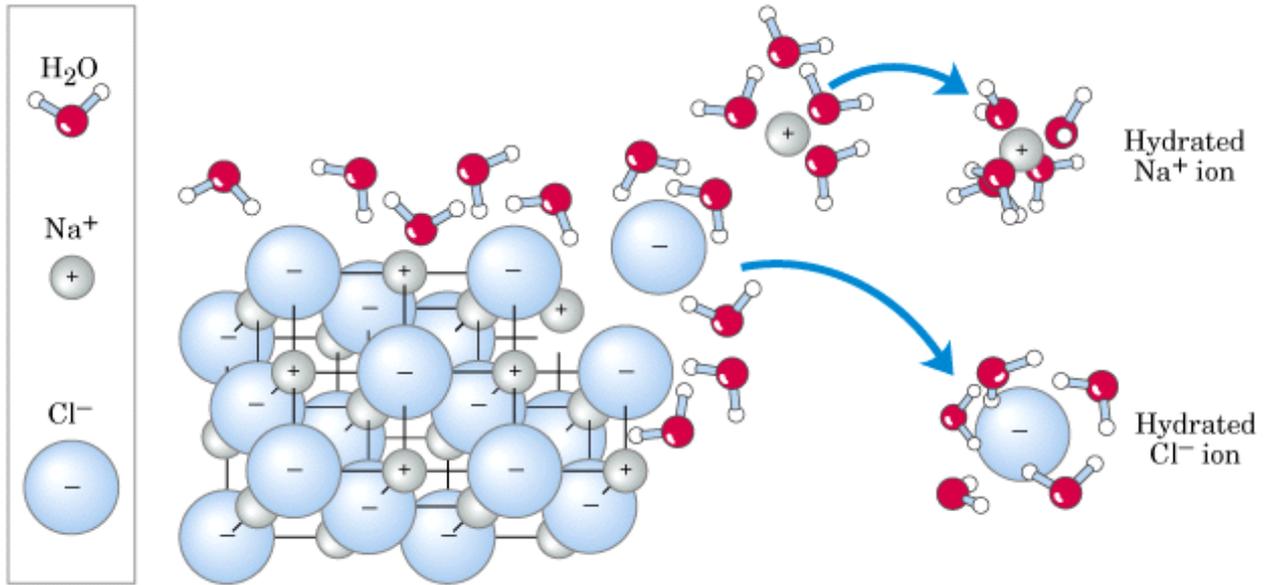
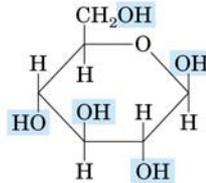


table 4-2

**Some Examples of Polar, Nonpolar, and Amphipathic Biomolecules
(Shown as Ionic Forms at pH 7)**

Polar

Glucose

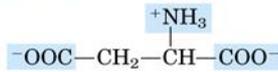


Polar groups
 Nonpolar groups

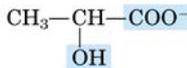
Glycine



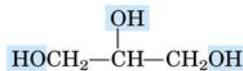
Aspartate



Lactate

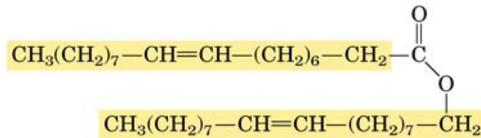


Glycerol



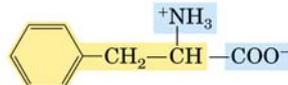
Nonpolar

Typical wax



Amphipathic

Phenylalanine



Phosphatidylcholine

