



SEMELWEIS EGYETEM

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet,
Nanokémiai Kutatócsoport



Biológiai rendszerek különleges komponense, a víz

Zrínyi Miklós

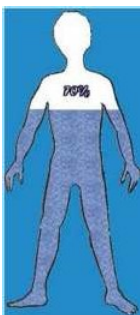
egyetemi tanár, az MTA tagja

mikloszrinyi@gmail.com

(2017)

A Föld felszínének 71%-át víz borítja, ez főleg sós víz. Az édesvíz 70%-a hó és jég formájában tárolódik.

Minden szervezet alapvető anyaga a víz. A medúzának még 98%-a, a három hónapos magzatnak 94%-a, az újszülöttnak még 72%-a, a felnőtt embernek 50-60%-a víz. Az életkor előrehaladtával a víz aránya csökken.



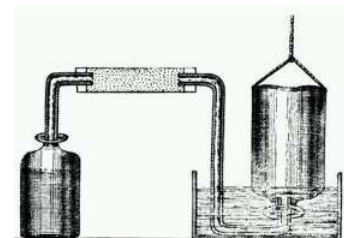
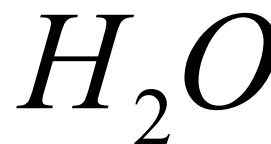
A napi vízleadás és vízfelvétel mérlegének mindkét oldalán átlagosan 2,5 liter szerepel: ennyi víz távozik a szervezetünkől a verejtékezés, a légzés, a kiválasztás és az emésztés folyamán, amit pótolnunk kell. Napi folyadékszükségletünk mintegy felét a táplálékokkal, másik felét víz formájában vesszük magunkhoz.

Egy különleges folyadék: a **víz**



Thales már Krisztus előtt 580-ban felismerte, hogy a víz „**minden dolgok forrása**”.

Kémiai összetételét először az angol Henry Cavendish határozta meg 1783-ban.



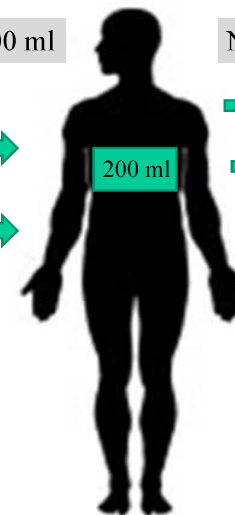
Az emberi test kortól függő víztartalma 45m% - 75m% (65m%)

Napi felvétel: 2500 ml

Napi leadás: 2500 ml

ital 1600 ml

étel 700 ml



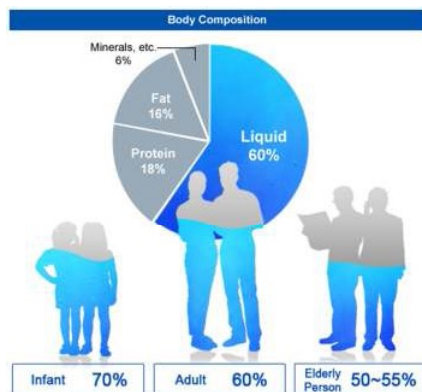
vizelet 1500 ml

széklet 200 ml

párolgás 400 ml

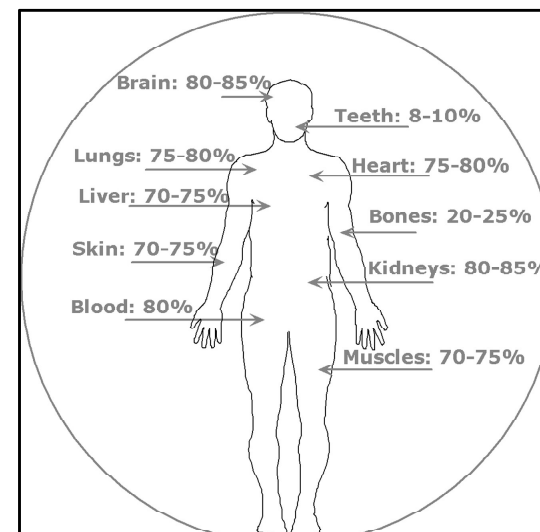
izzadás 100 ml

Ezek átlagos mennyiségek!



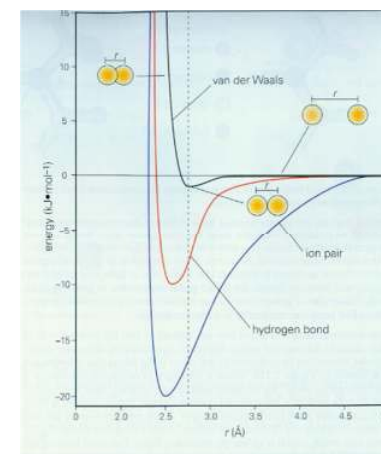
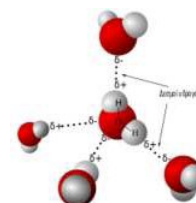
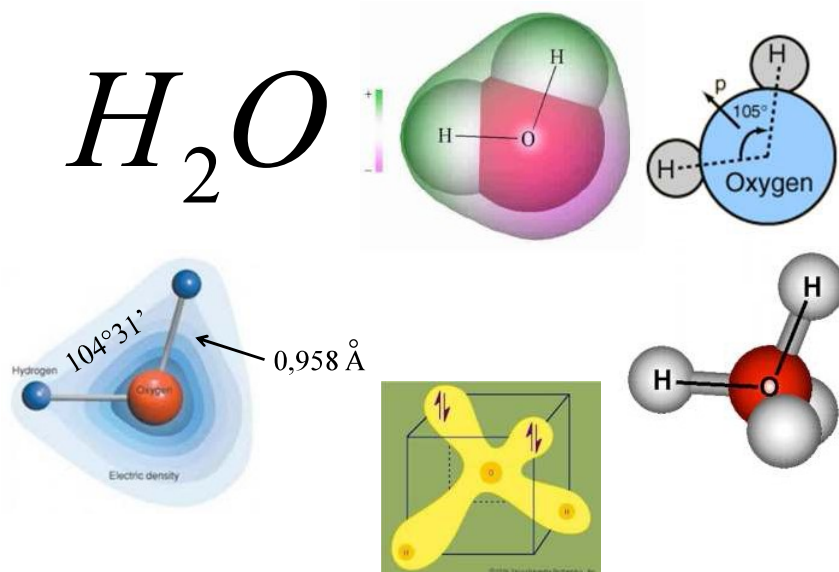
70 kg-os férfi szervezet átlagos folyadékmennyisége: 42 l.

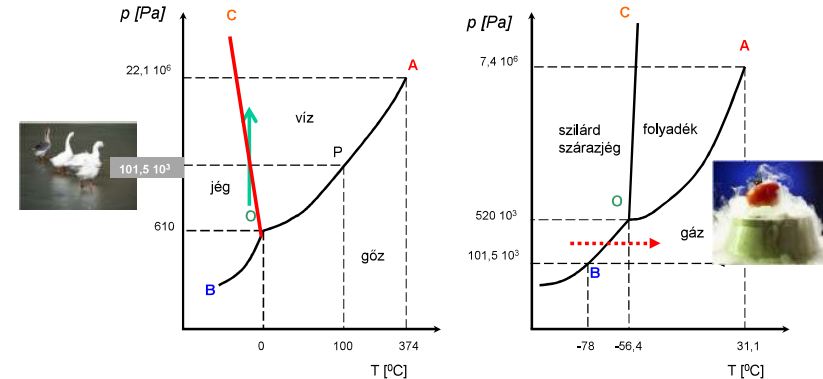
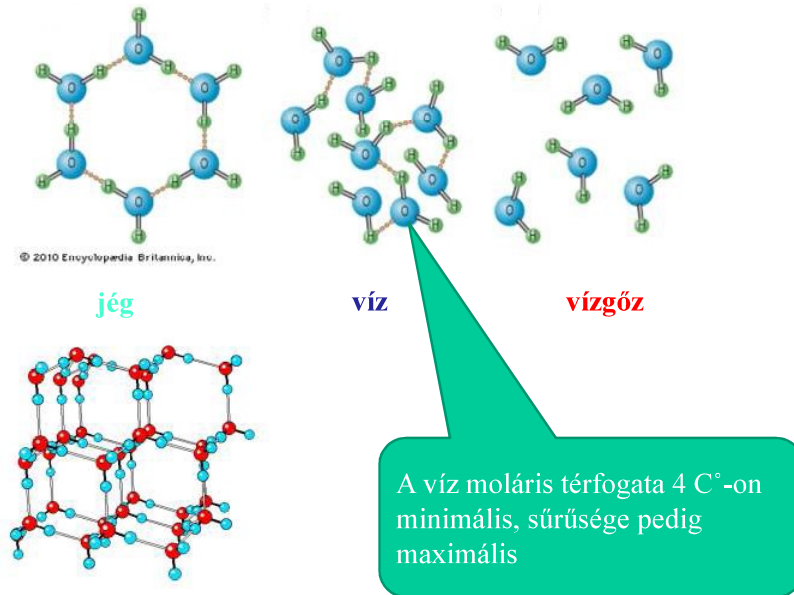
Különböző testrészek átlagos folyadék tartalma



A hidrogénhíd

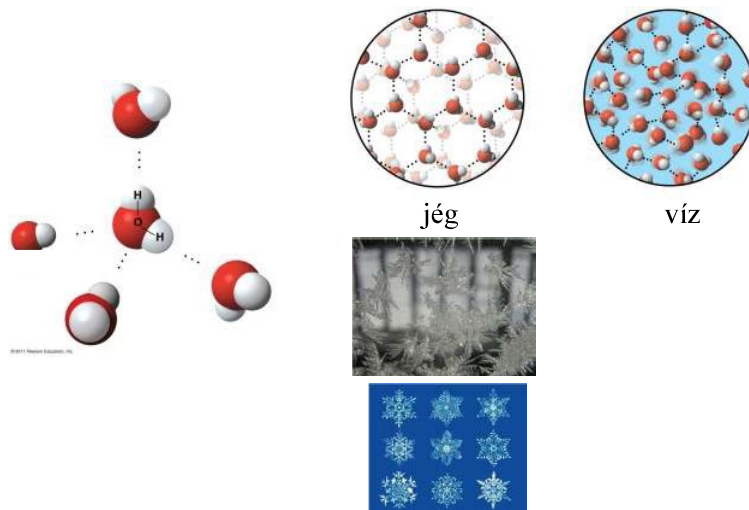
Egy intramolekuláris H-híd bontásához szükséges energia $\sim 1-2 k_B T$



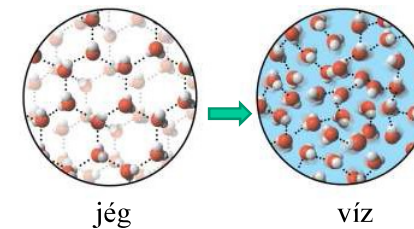


A víz és a szén-dioxid fázisdiagramja.

A legtöbb anyag moláris térfogata a kristályos fázisban kisebb, mint az olvadékban. **Kivétel: a víz**



A víz egyik különlegessége, hogy moláris térfogata 8%-al csökken olvadáskor. Ez azt jelenti, hogy a nyomás növelése az olvadást segíti elő.



Ha víz a többi folyadékhoz hasonló “normális” folyadékként viselkedne, **nem lennének hegyi patakjaink!**

Mi történne, ha a víz a többi anyaghoz hasonlóan viselkedne?

- nem lennének hegyi patakjaink,
- a jég lesüllyedne a vízben,
- folyók teljes egészében befagynának,

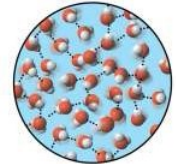
Víz hőkapacitása

$$Q = C(T) m \Delta T$$

A folyékony víz hőkapacitása jóval nagyobb, mint a többi folyadéké, de nagyobb a szilárdtestek és a gázok hőkapacitásánál is. Ez a víz molekulái között kialakuló számtalan H-híd kölcsönhatás következménye.

$$c_p = 4180 \text{ J/kgK szobahőmérsékleten}$$

Szerepe az életfolyamatokban: a testhőmérséklet szabályozása a nagy hőkapacitás segítségével

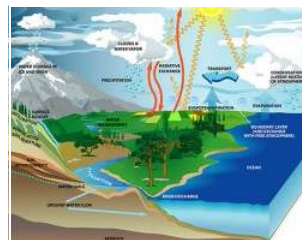
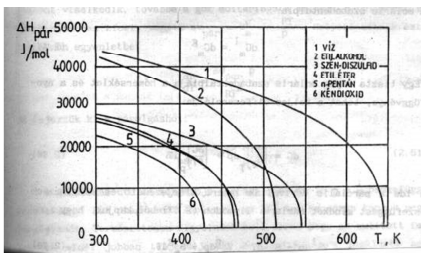


víz

$$E_H = 4 - 40 \text{ kJ / mol}$$

Egy 60 kg-os személy megközelítőleg 10 MJ nagyságú hőt ad le naponta, ha rendszeren táplálkozik. Ez adiabatikus körülmények között 42 C°-os hőmérséklet emelkedést jelent

A víz nagy párolgáshője miatt egységnyi térfogatban több energiát tárol, mint a többi „normális” folyadék.



$$Q_{\text{párolg}} = 2,3 \cdot 10^6 \text{ J/kg szobahőmérsékleten}$$

Szerepe az életfolyamatokban: hatékony hűtőfolyadék a hőmérséklet szabályzásban (izzadás).

Kedveli a poláros felületeket (pl. cellulóz)
(kapilláris emelkedés)



Nem kedveli az apoláros felületeket
(pl. teflon)



Nagy felületi feszültség

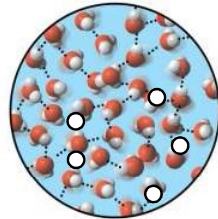
$$\gamma = 72,7 \text{ mN / m} \quad 25 \text{ C}^\circ\text{-on.}$$



Szerepe az életfolyamatokban: intenzívebb folyadék felszívódás.

Jó oldószer

A hézagos vízszerkezet miatt jó oldószere a gázoknak (O_2, CO_2, \dots).



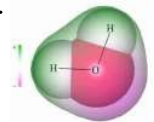
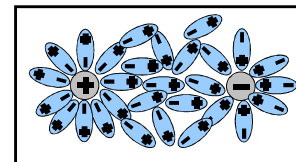
A jól elegyedik poláros molekulákkal (CH_3CH_2OH)

Mengyelejev szabadalma alapján



Jó oldószer

A vízmolekulák az ionok körül rendezett szerkezetű **hidrát réteget** hoznak létre. Ezt a folyamatot **hidratációnak** nevezzük.



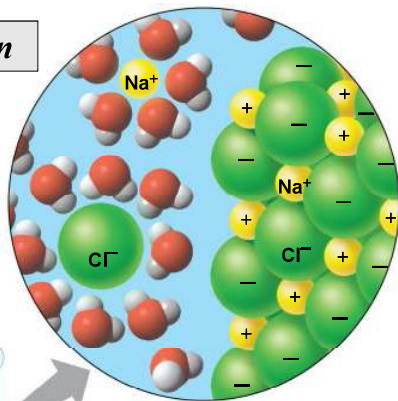
Dielektromos állandó 25 C°-on: 78,54

A különböző előjelű töltések közt ható erők a közeg dielektromos állandójának (relatív permittivitásának) növelésével csökkennek.

A **nagy dielektromos állandójú víz** az ionok kölcsönhatásának energiáját több mint 80-ad részére csökkenti. Ez a nagymérvű energia csökkentés felelős a víz kiváló oldó hatásáért.

Sók oldása vízben

Jó oldószer



Miért különülnek el a kationok és az anionok?
A Coulomb törvény talán nem érvényes?

© 2011 Pearson Education, Inc.

Coulomb törvény

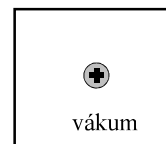
Vákumban!

$$\mathbf{f}_{1,2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r_{1,2}^2} \cdot \mathbf{e}_{1,2}$$

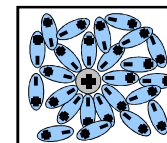
$$\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1}$$



Közeg hatás!



(szolvatáció)
hidratáció



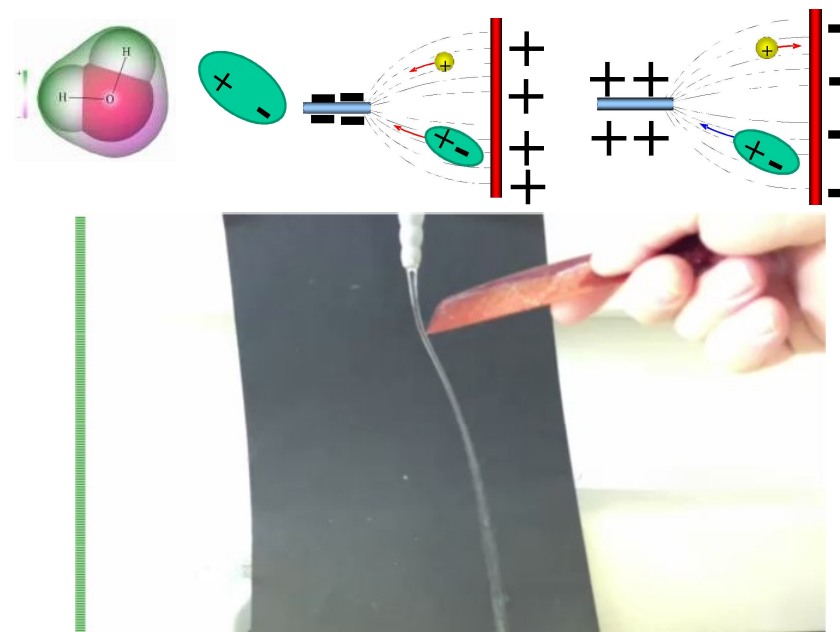
$$\mathbf{f}(\mathbf{r}_{1,2}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{q_1 q_2}{r^2} \mathbf{e}_{1,2}$$

ϵ_r : relatív permittivitás (dielektromos állandó)

Az **árnyékoló hatás** mértéke a molekula elektronszerkezetének aszimmetriájától függ. Ha a molekula poláros, azaz az elektronok molekulán belüli eloszlása nem egyenletes, hanem aszimmetrikus, akkor ez a hatás erősebb, mint apoláros (szimmetrikus elektroneeloszlású) molekulák esetében.

$$\mathbf{f}_C(\mathbf{r}_{1,2}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{q_A q_B}{r^2} \mathbf{e}_{1,2}$$

Anyag	Relatív permittivitás (Dielektromos állandó)
víz	78,5
hangyasav	51,1
dimetil-szulfoxid	47,2
dimetil-formamid	38,3
metanol	33,0
etanol	25,3
aceton	21,0
kloroform	4,8
benzol	2,3
hexán	1,9
levegő	1,0



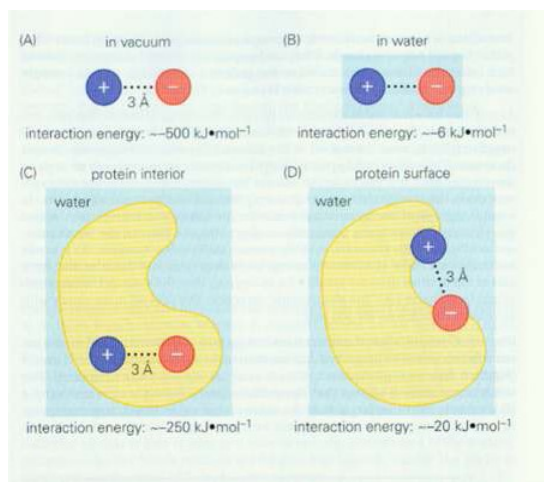
Közeg hatás

$$\mathbf{f}_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r_{1,2}^2} \cdot \mathbf{e}_{1,2}$$

$$\mathbf{E}_o(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{f}_1}{q_1} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_2}{r_{1,2}^2} \cdot \mathbf{e}_{1,2}$$

$$U(r) = G(r) = \int_{\infty}^r E_o dr = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r}$$

$$u_c(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{q_1 q_2}{r}$$



Energia-, vagy entrópikus eredetű a hidratált ionok közötti kölcsönhatás?

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

$$dG = Vdp - sdT$$

$$\Delta U(r) = \Delta G(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{q_1 q_2}{r}$$

$$\Delta S(r) = -\frac{\partial \Delta G}{\partial T} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r^2} \frac{\partial \epsilon_r}{\partial T}$$

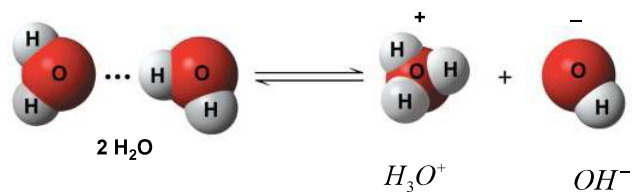
$$\Delta S(r) = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r} \cdot \frac{\partial \epsilon_r}{\epsilon_r \partial T} = \Delta G \frac{1}{\epsilon_r} \frac{\partial \epsilon_r}{\partial T}$$

$$\frac{1}{\epsilon_r} \frac{\partial \epsilon_r}{\partial T} = -0,0046 \longrightarrow \Delta S = -0,0046 \cdot \Delta G \longrightarrow T\Delta S = -1,38 \cdot \Delta G$$

Meyer B. Jackson: kísérleti adatokból

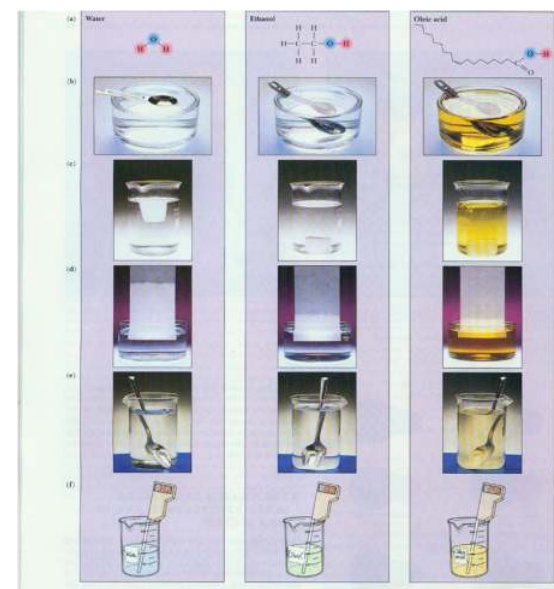
↑
entrópikus eredet!

Autoprotolízis



$$K_v = 10^{-14} \longrightarrow pH \quad 10^{-7} \text{ mol / dm}^3 \quad 10^{-7} \text{ mol / dm}^3$$

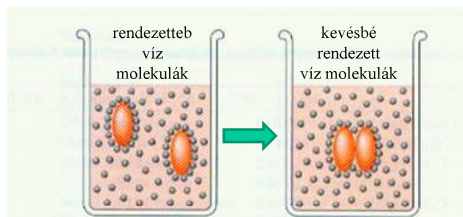
Szerepe az életfolyamatokban: savas, semleges és lúgos formában egyaránt előfordulhat.



Hidrofób kölcsönhatás

hajtóerő $\rightarrow \Delta S > 0 \rightarrow \Delta G < 0$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$



$$\Delta H > 0$$

$\Delta S > 0 \rightarrow \Delta G < 0$



W. Kauzman

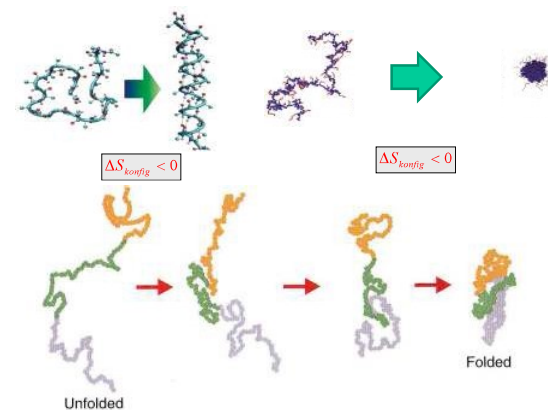


Molekuláris rendeződés

Mi a hajtóerő?

gombolyag \rightarrow hélix

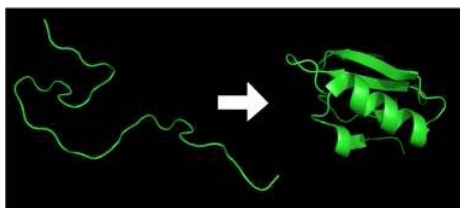
gombolyag \rightarrow globula



A MÁSODLAGOS SZERKEZET KIALAKULÁSÁNAK HAJTÓEREJE

hajtóerő

$$\Delta G < 0$$



A konformációs entrópia csökken!

$$\Delta G_{konf} = \Delta H_{konf} - T\Delta S_{konf}$$

$$\Delta H_{konf} \leq 0$$

$$\Delta S_{konf} \ll 0$$

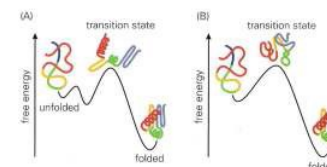
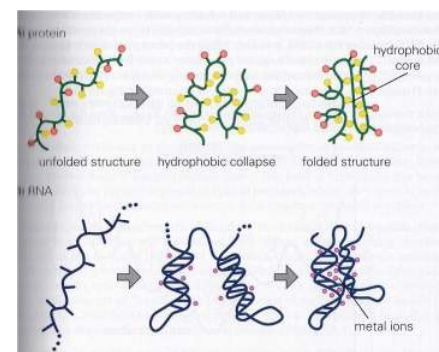
$$\Delta G_{konf} > 0 ?$$

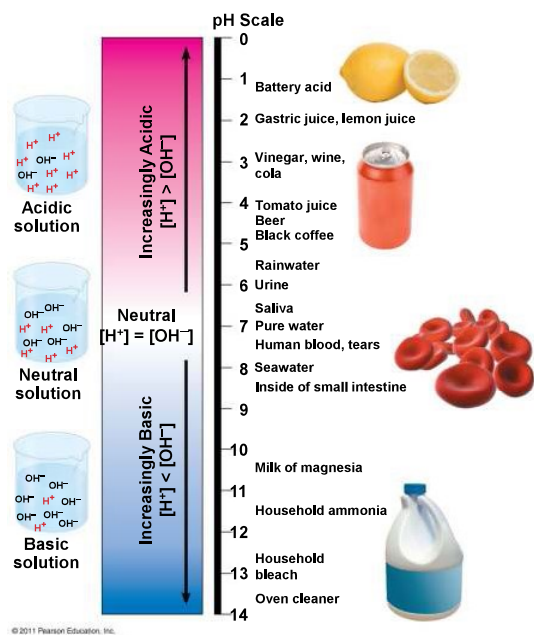
$$\Delta G_{tot} = \Delta G_{konf} + \Delta G_{water}$$

Hidrofób kölcsönhatás

$$\Delta H_w \quad -T\Delta S_w$$

A hajtogatódás termodinamikai hajtóereje a hidrofób kölcsönhatás





Testnedvek, -folyadékok pH értéke		
Szerv, folyadék vagy membrán	pH	pH funkciója
Bőr	4- 6,5	Védelem a mikrobák ellen
Vizelet	4,6-8,0	Korlátozza a mikrobák túlszaporodását
Gyomor	1,35-3,5	Fehérjebontáshoz szükséges
Epe	7,6-8,8	Semlegesíti a gyomorsavat, segíti az emésztést
Hasnyálmirigy folyadék	8,8	Semlegesíti a gyomorsavat, részt vesz az emésztésben
Agyl-gerincvelői folyadék	7,3	Védelmet képez
Intracelluláris folyadék	6,0-7,2	A sejtek savtermelésének megfelelően
Vérszérum, vénás	7,35	Szűk határokon belül szabályozott
Vérszérum, artériás	7,45	Szűk határokon belül szabályozott

MNO grafika/ Kötél Kinga

Savas karakterűek	Lúgos karakterűek	Semlegesek
Gabonából készült kenyér	Sajt	Vaj
Egyes gabonából készült élelmiszerek	Tészta	Édességek
Maple szirup	Lekvár	Fekete kávé
Szilva	Tej	Kukoricakeményítő
Hús	Szőlőgyümölcs	Disznósér
Dió	Mandula	Margarin
Földimogyoró	Méz	Növényi olaj
Hüvelyesek	Legelőzöldség	Kristálycukor

Grafika: MNO Grafika / Máté István

Készítve

ÓVAKODJ !

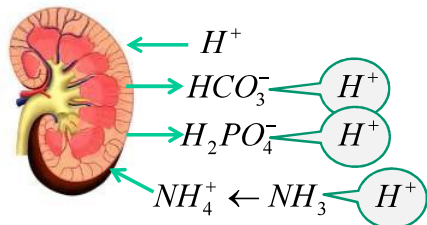
FUREDI Orion ivóvíz
pH 9.3

AZÉRT MERT MILLIÓAN HISZÜNK EGY BOLOND DOLOGBAN
Attól az még bolondság marad!

www.furedi.com

A vér pH-ja

M=70 kg \rightarrow $0,1 \text{ mol } H^+$
 $12 \text{ mol } CO_2$ } $pH=?$

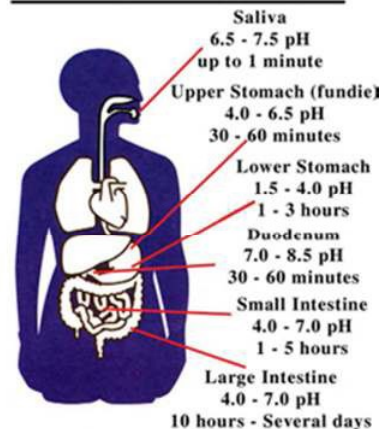


$pH \rightarrow 4,5$



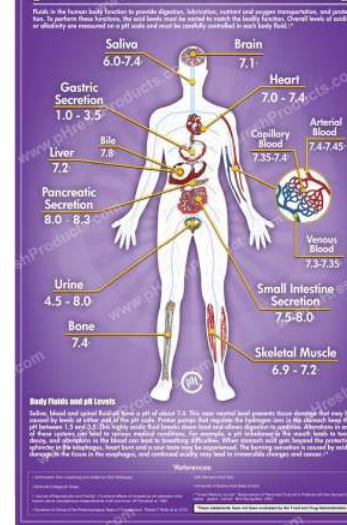
$pH: 7,35-7,45$

The Human Digestive Tract pH Range Chart



The diagram illustrates the average time food spends in each part of the digestive system along with the average pH.

pH Values of the Human Body



A szervezet folyadékterei

Intracelluláris folyadék ICF

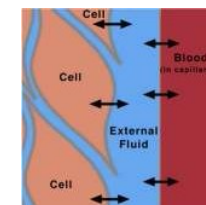
A sejten belüli folyadék-
 mennyiséget jelöli.
 A testsúly kb. 36 %-a (25 l).

Extracelluláris folyadék ECF

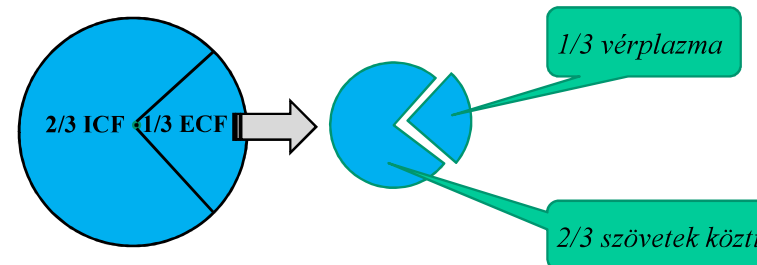
A sejten kívüli összes
 folyadékmennyiséget jelöli.
 A testsúly kb. 24 %-a (17 l).

Plazmavíz
 Intersticiális folyadék
 Fibrózus kötőszövet
 Csontállomány víztartalma
 Transzcelluláris folyadék

Vizes oldatok sejt szintű megoszlása



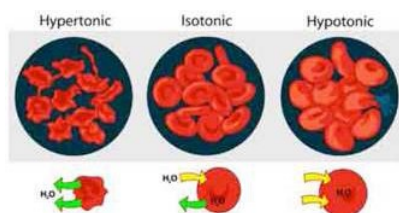
víz \rightarrow **Intra**celluláris folyadék (ICF)
 \rightarrow **Extra**celluláris folyadék (ECF)



Izotóniás oldatok: ha két különböző oldat ozmózisnyomása egyező

Ha a koncentráció kisebb, mint az izotóniás oldaté, akkor:
 víz → sejt **hipotóniás oldat**
 Az extracelluláris térfogat növekszik.

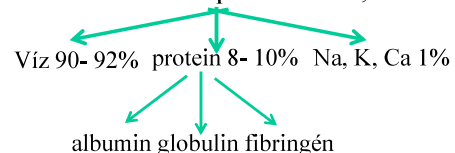
Ha a koncentráció nagyobb, mint az izotóniás oldaté, akkor:
 környezet ← sejtvíz **hipertóniás oldat**
 Az intracelluláris térfogat csökken



Vér

Felnőtt ember keringő vértömege az össztömegének 6-8 %-a.
 (4 – 6 l)

Összetétele: vérplazma 55%, alakos elemek 45%.



Viszkozitása 4-5 szöröse a vízének (3 – 6 mPas)

Sűrűsége: 1060 kg/m^3 pH: 7,35–7,45

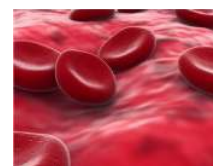
Osmolaritása: 300 mOsm (0.3 Osm)

Hőmérséklete: 38°C

Testfolyadék összetétele

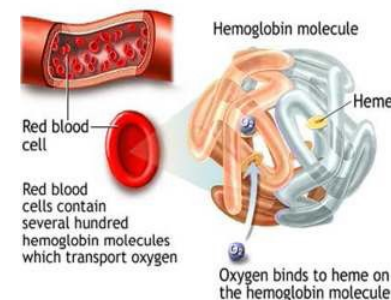
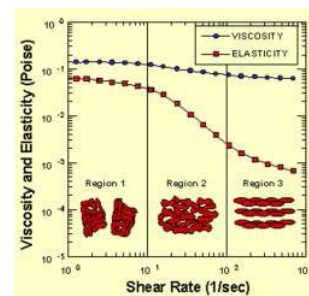
anyag	ICF [%]	ECF	
		szöveti [%]	plazma [%]
K^+	75	3	3
Mg^{2+}	17	1	1
Na^+	6	94	94
Ca^{2+}	2	2	2
protein	27	-	10
PO_4^{3-}	20	1	1
HCO_3^{2-}	6	18	16
Cl^-	2	77	69
más	45	4	4

Legfontosabb szerepe: **anyag**transzport és **energia**(hő)transzport



5 millió vörösvértest minden mm^3 -ben.

0,8 % bomlik és keletkezik minden nap





SEMMELWEIS EGYETEM

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet,
Nanokémiai Kutatócsoport



Makromolekulák konformációja

Zrínyi Miklós

egyetemi tanár, az MTA tagja
mikloszrinyi@gmail.com

2017

Kötési energiák és a molekulák stabilitása

Single Bonds											
H	C	N	O	F	Si	P	S	Cl	Br	I	
436	415	390	464	569	395	320	340	432	370	295	H
	345	290	350	439	360	265	260	330	275	240	C
		160	200	270	—	210	—	200	245	—	N
			140	185	370	350	—	205	—	200	O
				160	540	489	285	255	235	—	F
					230	215	225	359	290	215	Si
						215	230	330	270	215	P
							215	250	215	—	S
								243	220	210	Cl
									190	180	Br
										150	I
Multiple Bonds											
C=C	611	C=N	615	C=O	741	N=N	418	O=O	498		
C≡C	837	C≡N	891	C≡O	1080	N≡N	946				

Makromolekulák



Kolloid asszociátumok, vagy kovalens
kötésű molekulák?



Hermann Staudinger (1881- 1962)

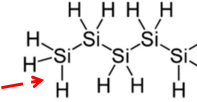
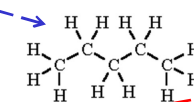
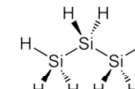
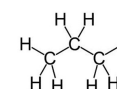
The Nobel Prize in Chemistry 1953

Valamennyi elem közül a szén az egyetlen, amelynek atomjai
korlátlan számban kapcsolódhatnak közvetlenül egymással, a
létrejövő molekulák stabilitásának csökkenése nélkül.

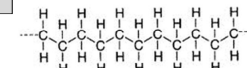
Szerves és szervetlen polimerek

Kötési energiák; kJ/mol

bond	Energy kJ/mol
C-C	345
C-O	350
C-N	290
C-P	265
Si-Si	226



Nagyobb kötési energia
stabilabb molekula!



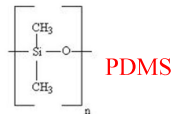
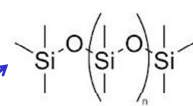
poliszilán
Nem stabil!

kötés	Energia kJ/mol
C-C	345
Si-H	395
Si-Si	226

SiH_4 stabil molekula

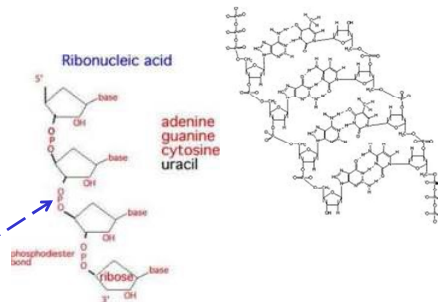
Si_5H_{12} **igen bomlékony**

kötés	Energia kJ/mol
C-C	345
Si-O	370



PDMS

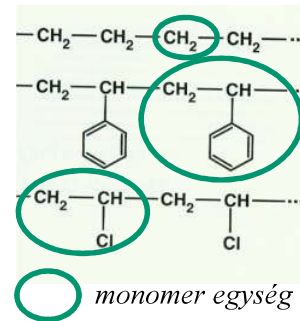
kötés	Energia kJ/mol
C-O	350
C-N	290
P-O	350



Polimerek és makromolekulák óriás molekulák!

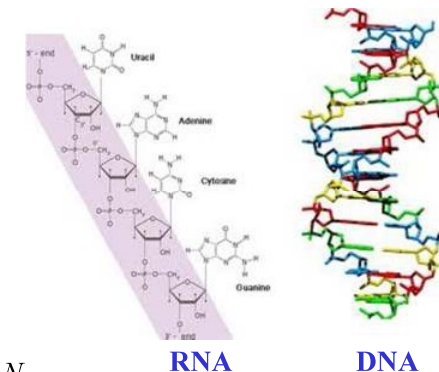
szintetikus

biopolimer



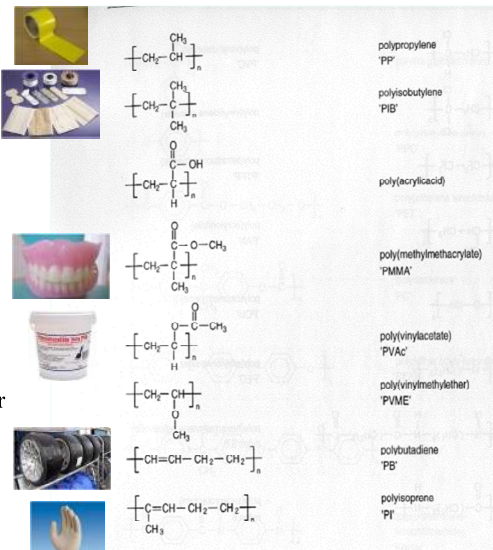
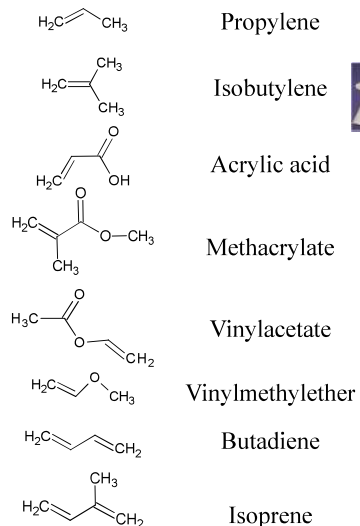
Monomer egységek száma: N

A leghosszabb makromolekula a DNS: $10^9 < N < 10^{10}$
Néhány méter is lehet!



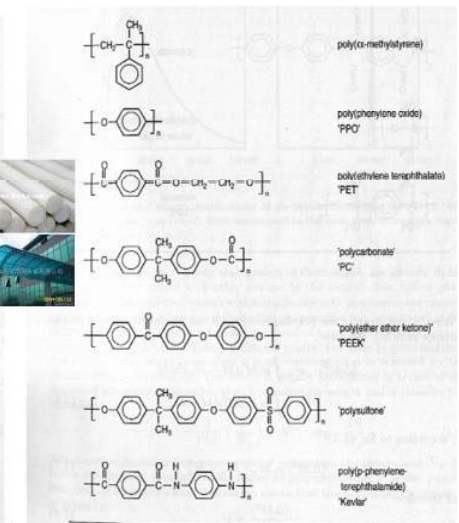
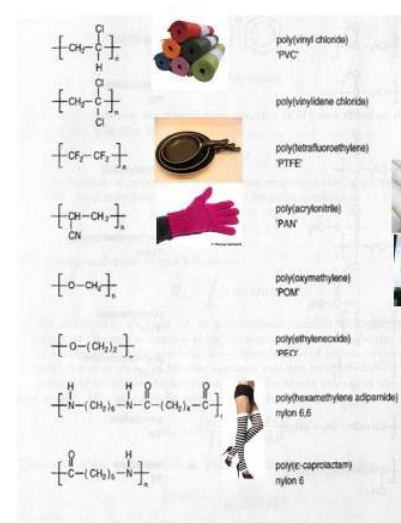
Monomerek

Monomer egységek



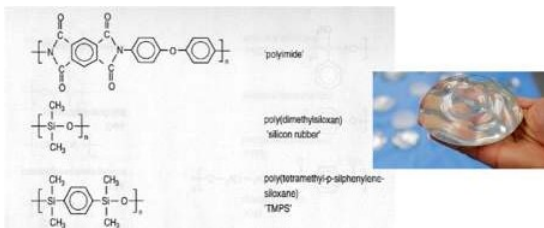
Monomerek

Monomer egységek





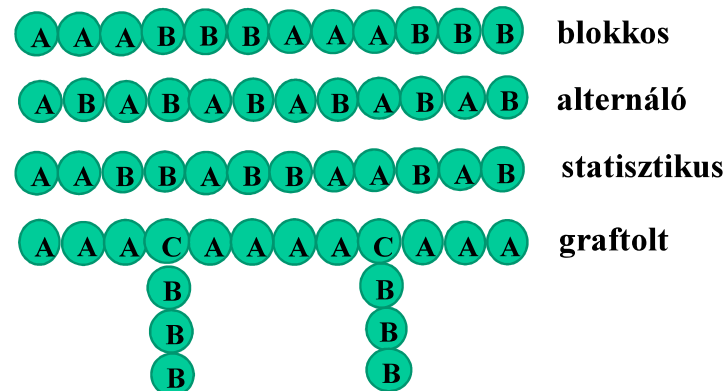
Monomer egységek



Homopolimer

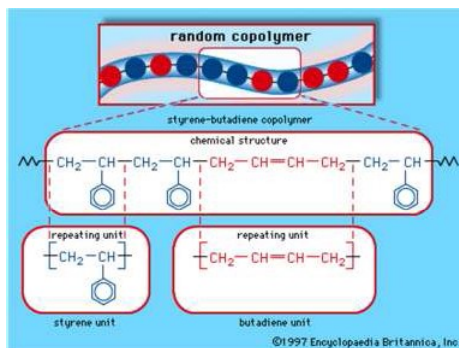


Kopolimer nomenklatura



Kopolimer példák

Szintetikus polimerek



Biopolimerek

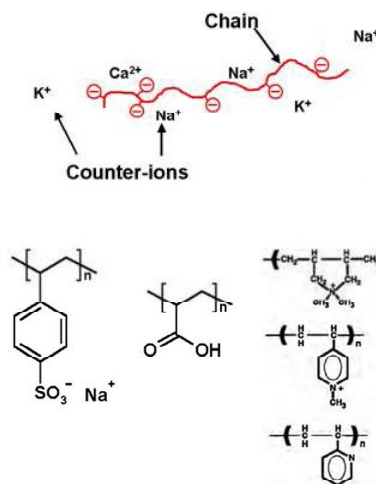
DNS:
négy különböző
monomer egység

fehérjék:
húsz különböző aminosav

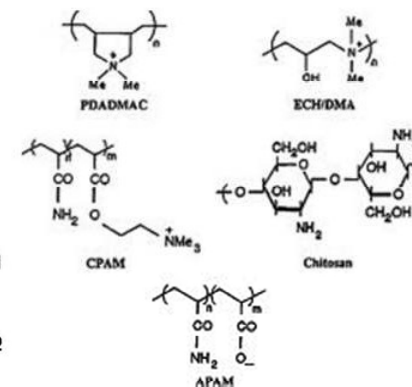
↓
aminosavak

Polielektrolitok

Anionos

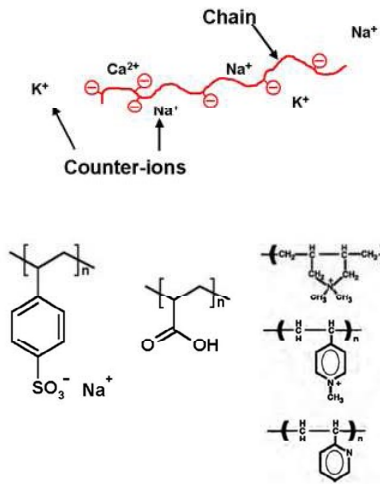


Kationos

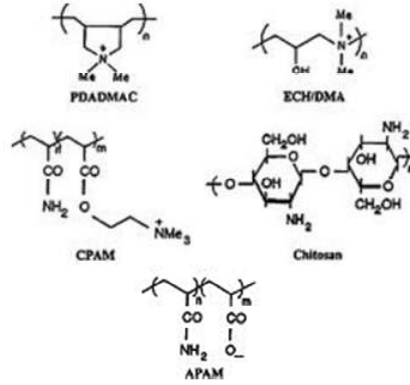


Polielektrolitok

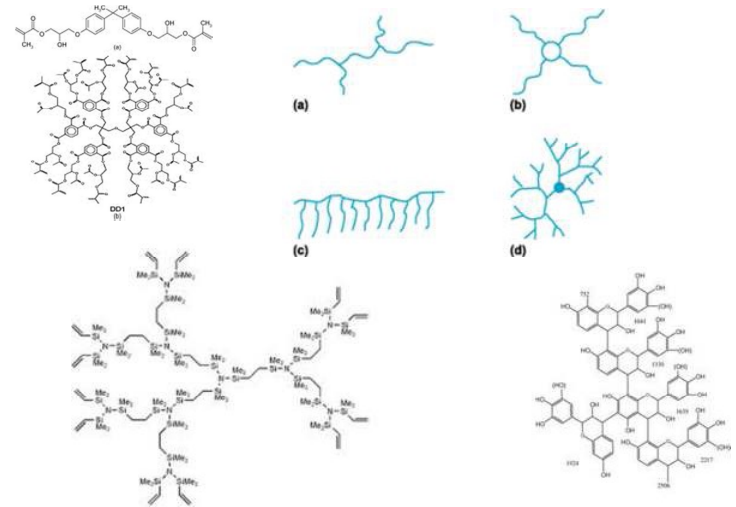
Anionos



Kationos



Elágazó polimerek



Térhálós polimerek

