

SEMMELWEIS EGYETEM

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet,
Nanokémiai Kutatócsoport



Biológiai rendszerek különleges komponense, a víz

Zrínyi Miklós

egyetemi tanár, az MTA tagja

mikloszrinyi@gmail.com

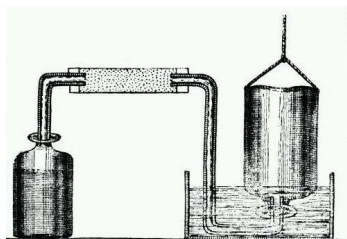
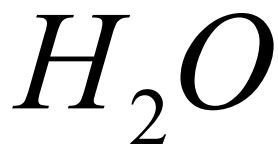
(2018)

Egy különleges folyadék: a **víz**



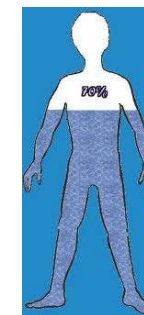
Thales már Krisztus előtt 580-ban felismerte, hogy a víz
„minden dolgok forrása”.

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



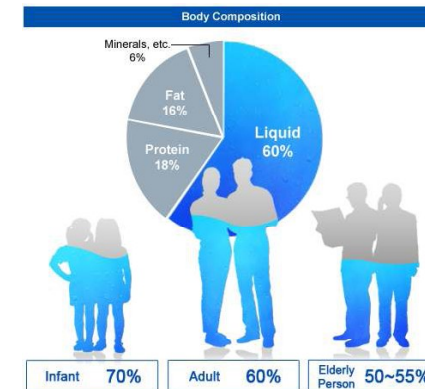
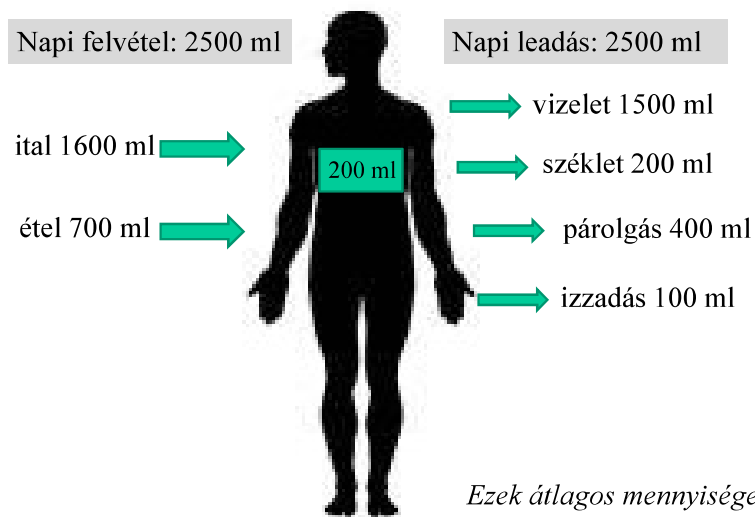
A Föld felszínének 71%-át víz borítja, ez főleg sós víz. Az édesvíz
70%-a hó és jég formájában tárolódik.

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.



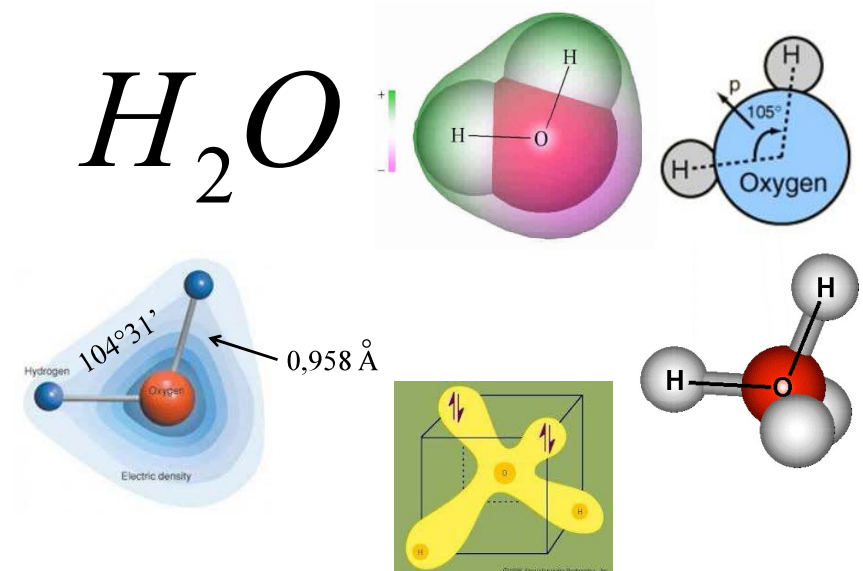
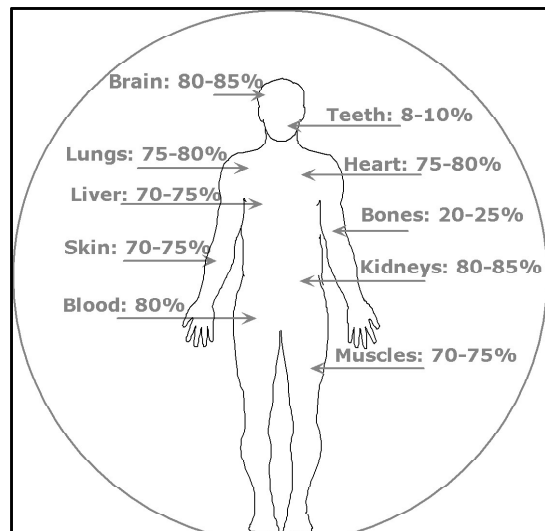
A napi vízleadás és vízfelvétel mérlegének mindkét oldalán
átlagosan 2,5 liter szerepel: ennyi víz távozik a szervezetünkől a
verejtekezés, a légzés, a kiválasztás és az emésztés folyamán, amit
pótolnunk kell. Napi folyadékszükségletünk mintegy felét a
táplálékokkal, másik felét víz formájában vesszük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

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



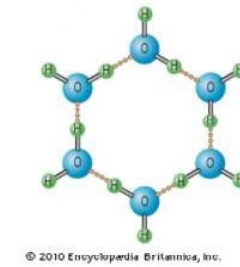
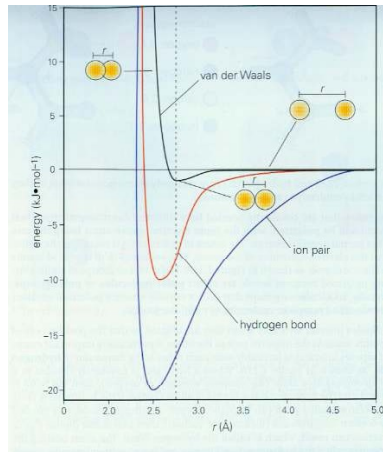
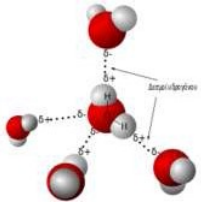
70 kg-os férfi szervezet átlagos folyadékmennyisége: 42 l.

Különböző testrészek átlagos folyadék tartalma

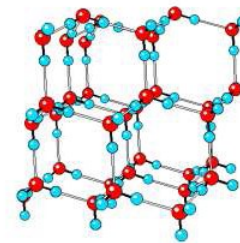


A hidrogénhíd

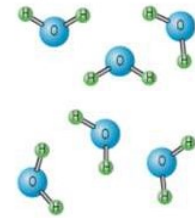
Egy intramolekuláris H-híd bontásához szükséges energia $\sim 1-2 k_B T$



jég

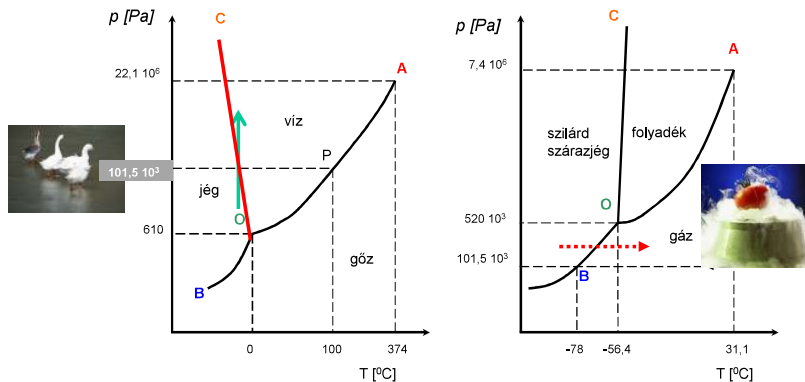


víz



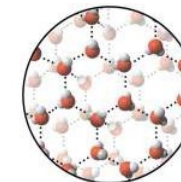
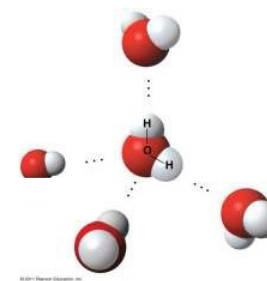
vízgőz

A víz moláris térfogata 4 °C-on minimális, sűrűsége pedig maximális

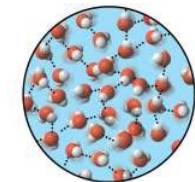


A víz és a szén-dioxid fázisdiagramja.

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



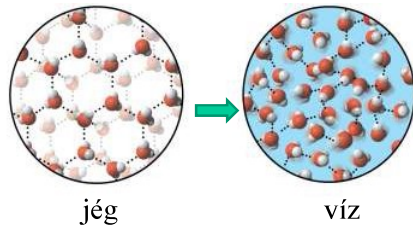
jég



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!**

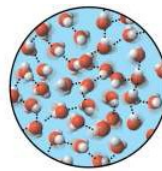
Víz hőkapacitása

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

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

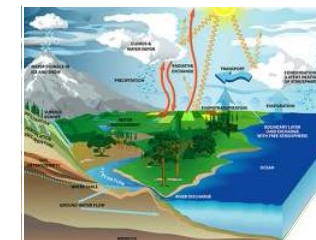
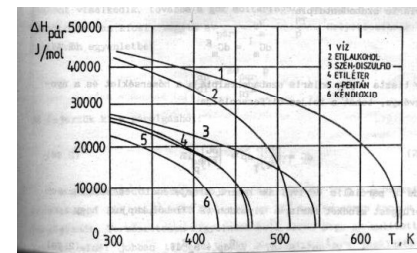
$$E_H = 4 - 40 \text{ kJ / mol}$$

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

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

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

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

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

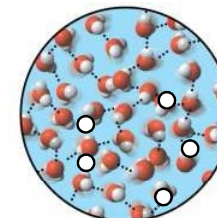


Szerepe az életfolyamatokban: intenzívebb folyadék felszívódás.



Jó oldószer

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



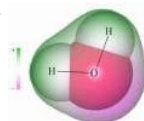
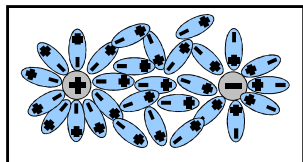
A jól elegyedik poláros molekulákkal
(CH_3CH_2OH)

Mengyelejev szabadalma alapján



Jó oldószer

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



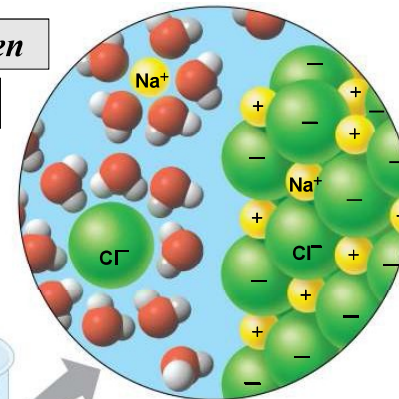
Dielektromos állandó 25 °C-on: 78,54

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?

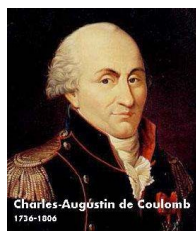
© 2011 Pearson Education, Inc.

Coulomb törvény

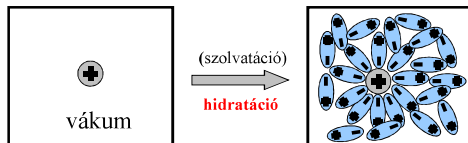
Vákumban!

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

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



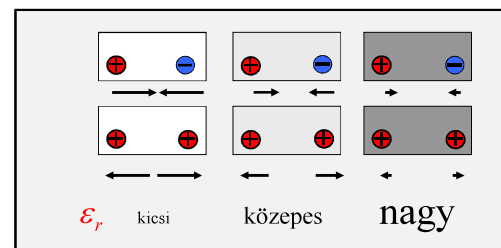
Közeg hatás!



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

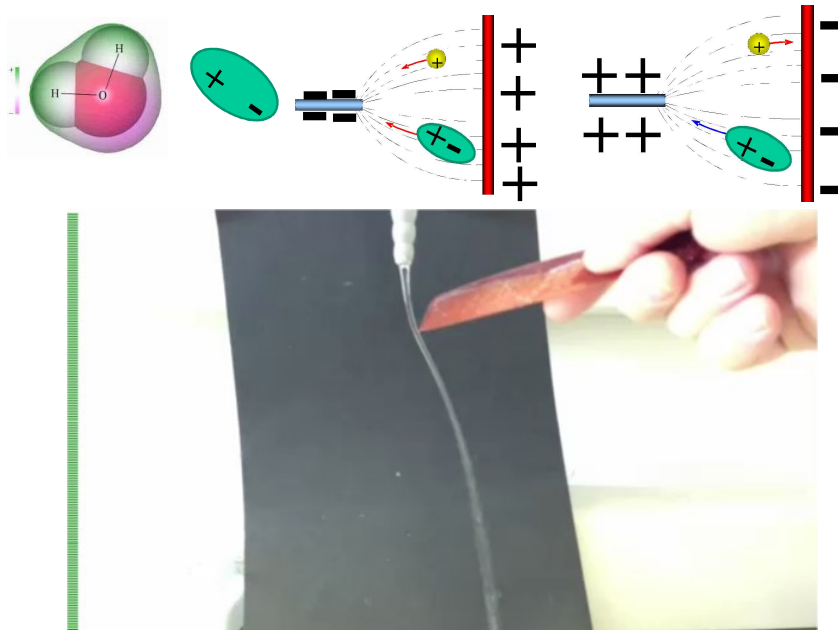
ϵ_r : relatív permittivitás (dielektromos állandó)

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 elektroneloszlású) molekulák esetében.



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

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



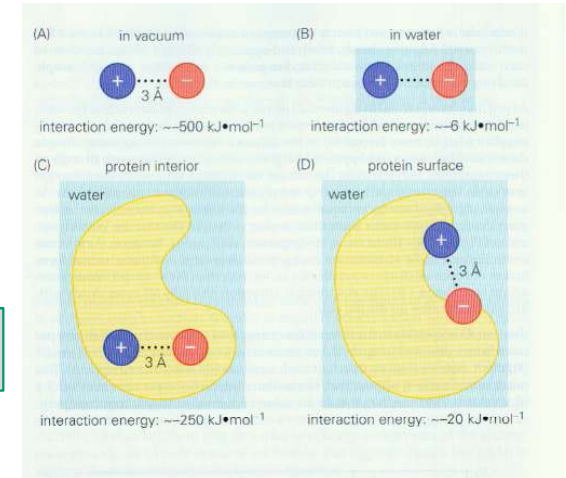
Közeg hatás

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

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

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

$$u_C(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_o \epsilon_r} \frac{q_A q_B}{r}$$



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

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

$$dG = Vdp - SdT$$

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

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

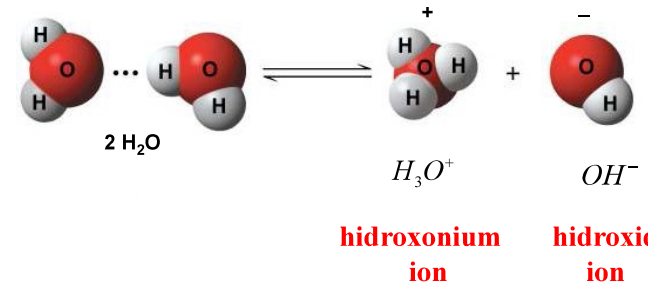
$$\Delta S(r) = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_o \epsilon_r r} \cdot \frac{\partial \epsilon_r}{\epsilon_r \partial T} = \Delta G \frac{1}{\epsilon_r} \frac{\partial \epsilon_r}{\partial T}$$

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

Meyer B. Jackson: kísérleti adatokból

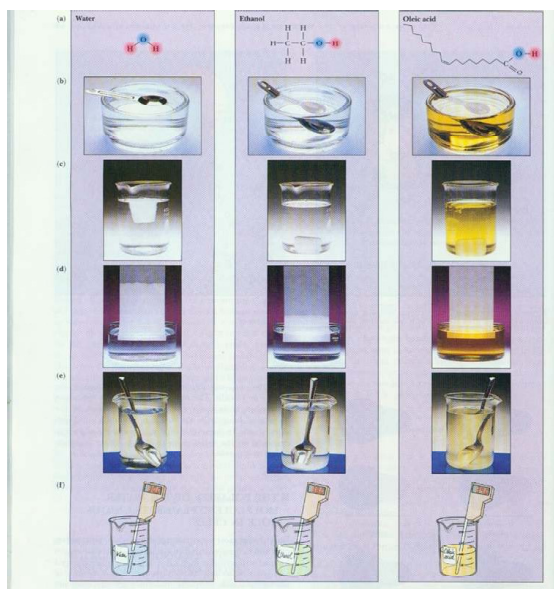
↑
entrópikus eredet!

Autoprotolízis



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

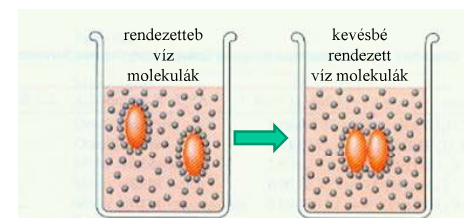
Szerepe az élett folyamatokban: savas, semleges és lúgos formában egyaránt előfordulhat.



Hidrofób kölcsönhatás

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

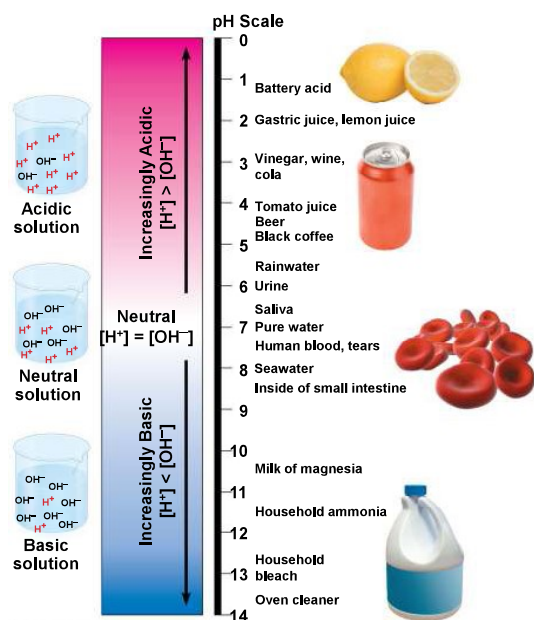
$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$



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



W. Kauzman



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	Sajtok	Vaj
Egyéb gabonából készült élelmiszerek	Tejcsin	Édességek
Magnez	Lekvár	Fekete kávé
Szilva	Tej	Kukoricakeményítő
Hús	Szélid gesztenye	Disznósír
Dió	Mandula	Margarin
Földinogyoró	Melasz	Növényi olaj
Hüvelyesek	Legtöbb zöldség	Kristálycukor

Crafika: MNO Grafika / Máté István

Készítve



ÓVAKODJ !

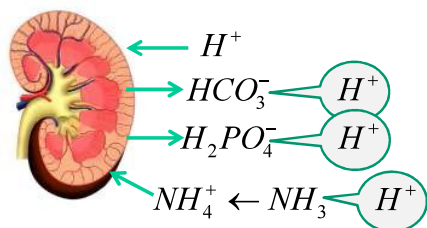
<http://mta.hu/tudomanyunnep2017/csodavizek-csodasok-fabian-istvan-tudomanyunnepi-eloadasa-videon-108268>



Érdeemes megnézni!

A vér pH-ja

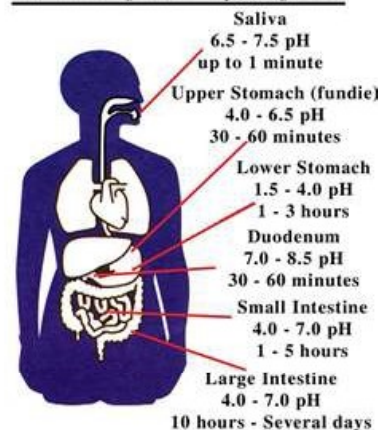
M=70 kg \rightarrow $0,1 \text{ mol } H^+$
 $12 \text{ mol } CO_2$ } pH=?



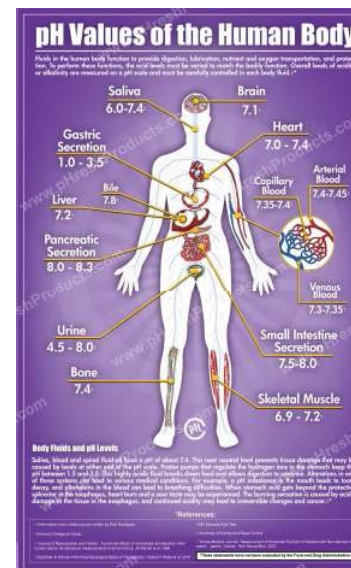
pH \rightarrow 4,5



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.



A szervezet folyadékterei

Intracelluláris folyadéktér

ICF

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

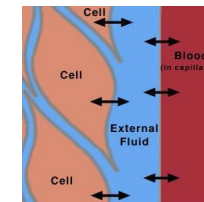
Extracelluláris folyadéktér

ECF

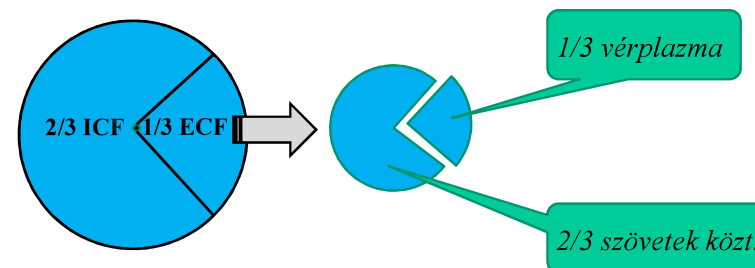
A sejten kívüli összes
folyadékmennyiséget jelöli.
A testsúly kb. 24 %-a (17 l).

*Plazmavíz
Intersticiális folyadék
Fibrózus kötőszövet
Csontállomány víztartalma
Transzcelluláris folyadék*

Vizes oldatok sejtszintű megoszlása



víz → **Intra**celluláris folyadék (ICF)
→ **Extra**celluláris folyadék (ECF)



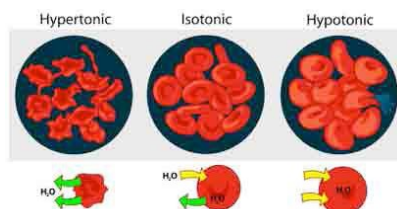
Izotóniás oldatok: ha két különböző oldat ozmózisnyomása egyező

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



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

Vér

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

Összetétele: vérplazma 55%, alakos elemek 45%.

Víz 90-92% protein 8-10% Na, K, Ca 1%

albumin globulin fibrinogén

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)

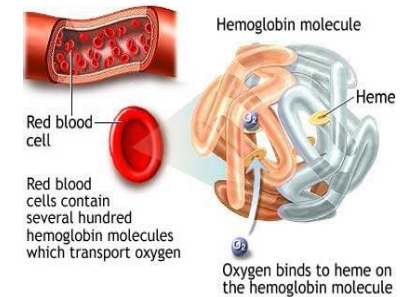
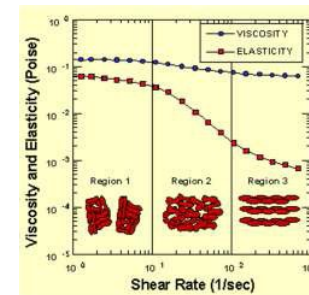
Hőmérséklete: 38°C

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

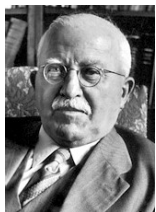


5 millió vörösvértest minden mm^3 -ben.

0,8 % bomlik és keletkezik minden nap



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.

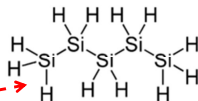
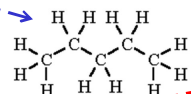
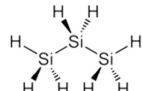
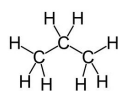
Kötési energiák és a molekulák stabilitása

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				

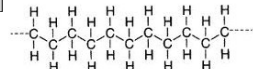
Szerves és szervetlen polimerek

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!



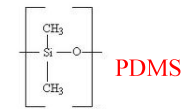
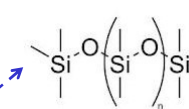
poliszilán
Nem stabil!

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

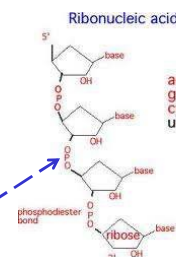
SiH_4 stabil molekula

Si_5H_{12} **igen bomlékony**

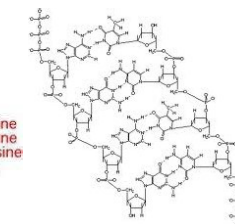
kötés	Energia kJ/mol
C-C	345
Si-O	370



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



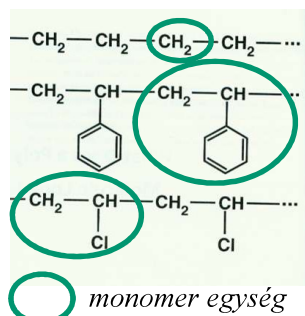
adenine
guanine
cytosine
uracil



Polimerek és makromolekulák óriás molekulák!

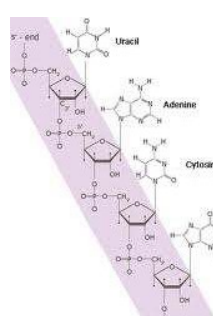
szintetikus

biopolimer

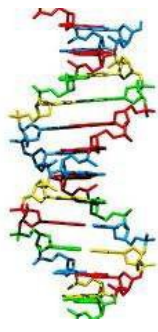


monomer egység

Monomer egységek száma: N



RNA

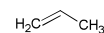


DNA

A leghosszabb makromolekula a DNS: $10^9 < N < 10^{10}$

Néhány méter is lehet!

Monomerek



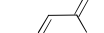
Propylene



Isobutylene



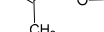
Acrylic acid



Methacrylate



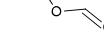
Vinylacetate



Vinylmethylether



Butadiene



Isoprene

Monomer egységek



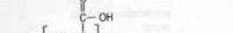
polypropylene
"PP"



polyisobutylene
"PIB"



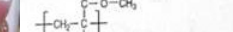
poly(acrylic acid)



poly(methylmethacrylate)
"PMMA"



poly(vinylacetate)
"PVAc"



poly(vinylmethylether)
"PVME"

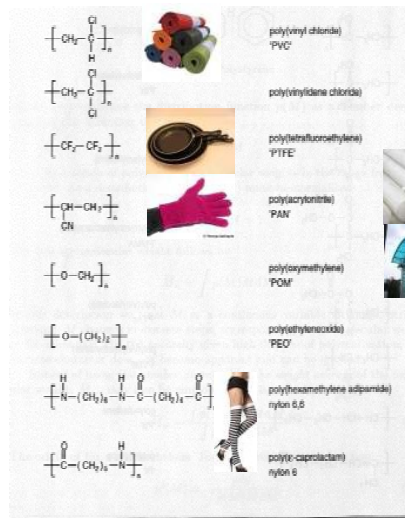


polybutadiene
"PB"

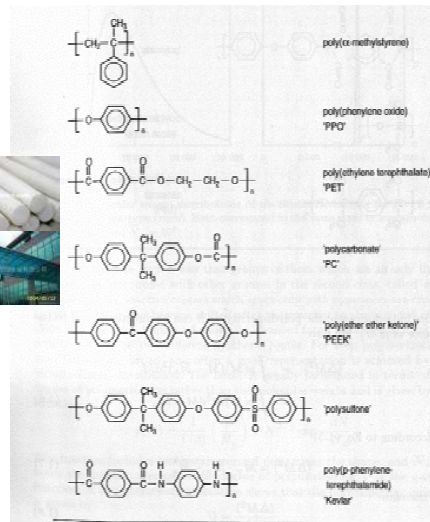


polyisoprene
"PI"

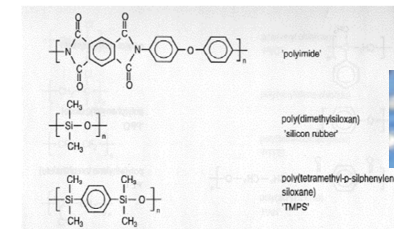
Monomerek



Monomer egységek



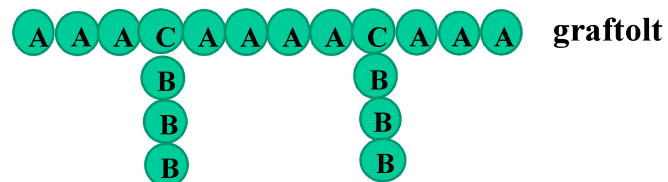
Monomer egységek



Homopolimer

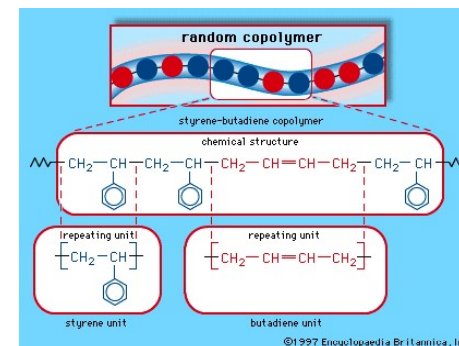


Kopolimer nomenklatura



Kopolimer példák

Szintetikus polimerek



Biopolimerek

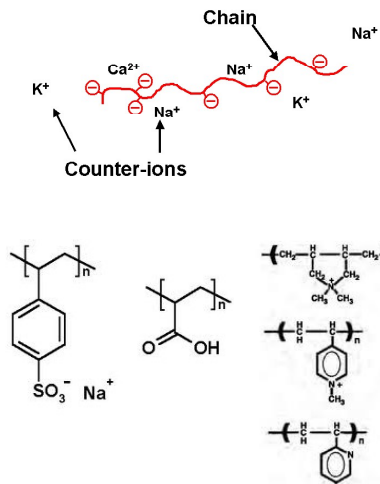
DNS:
négy különböző
monomer egység

fehérjék:
húsz különböző aminosav

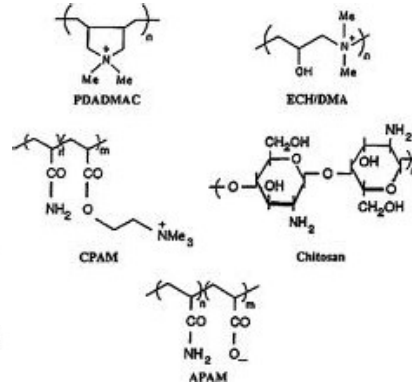
↓
aminosavak

Polielektrolitok

Anionos

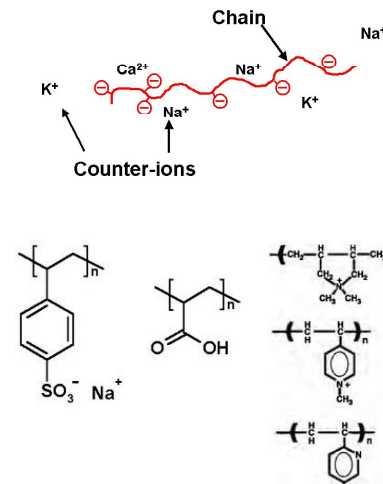


Kationos

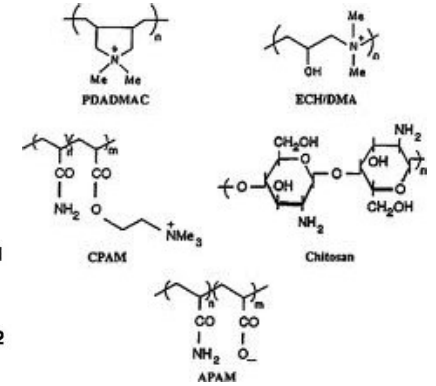


Polielektrolitok

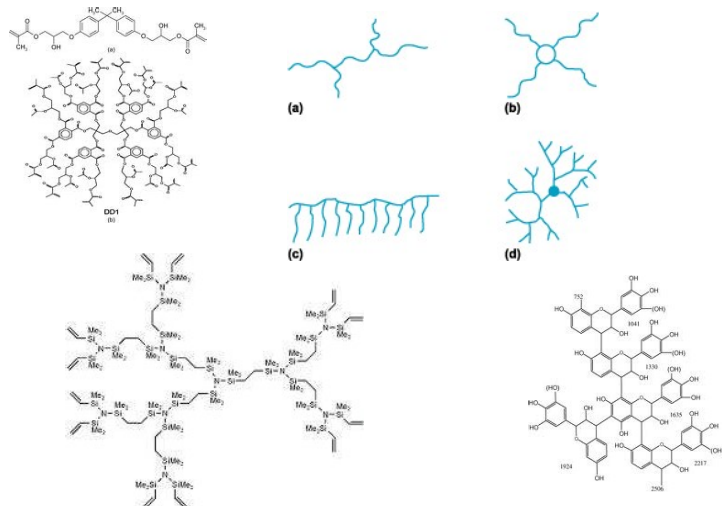
Anionos



Kationos



Elágazó polimerek



Térhálós polimerek

