

СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ БИОЛОГИИ И БИОТЕХНОЛОГИИ
КАФЕДРА БИОФИЗИКИ

Водородная связь

Выполнил:

студент 5 курса

Ронжин Никита

Красноярск 2009



Водородная связь в воде

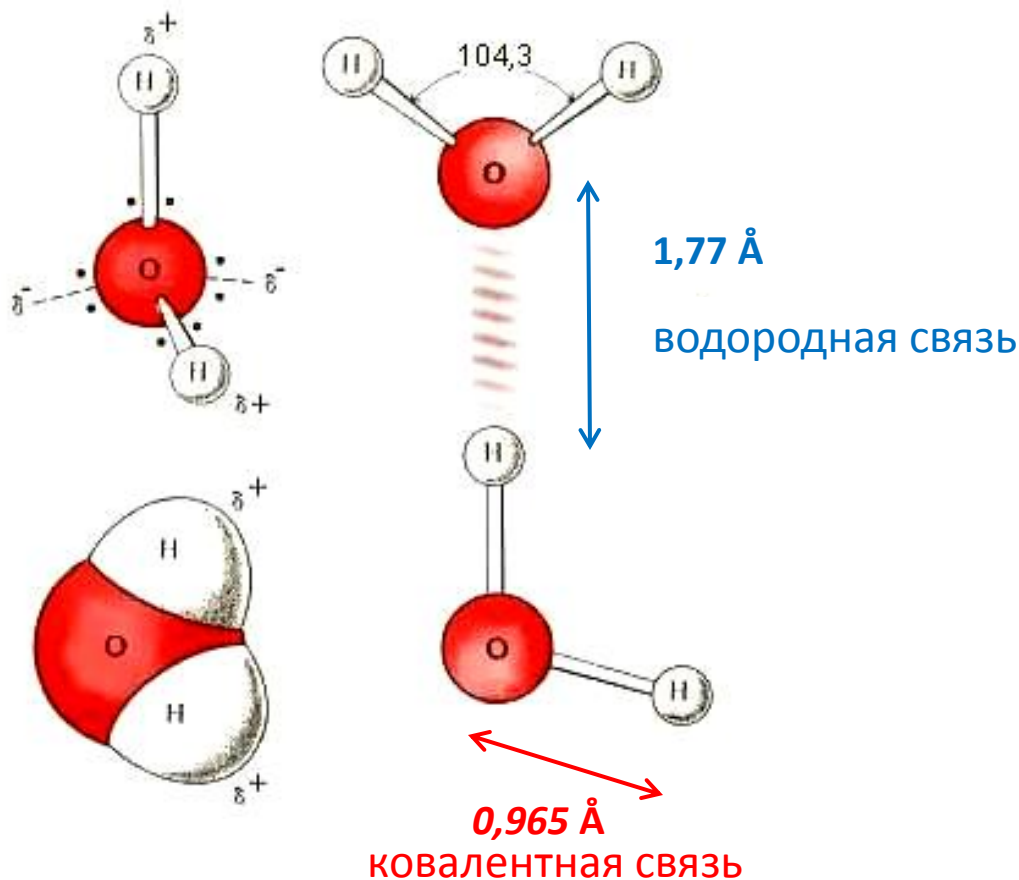
Понятие и термин **«водородная связь»** ввели В.Латимер и Р.Родебуш в 1920, для того, чтобы объяснить высокие температуры кипения воды, спиртов, и некоторых других соединений.

При кипении жидкости разрушаются **только Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия**, те, что удерживают молекулы в жидкой фазе. Если температуры кипения неожиданно высокие, то, следовательно, молекулы связаны дополнительно еще какими-то силами. В данном случае это и есть водородные связи.

	<i>T кипения, К</i>	<i>T замерзания, К</i>
H₂O	373	273
O₂	90	54
H₂	20	4

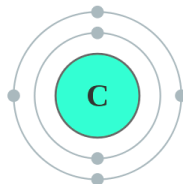
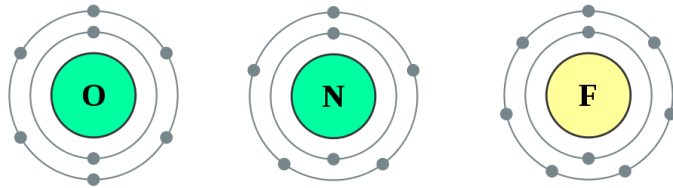
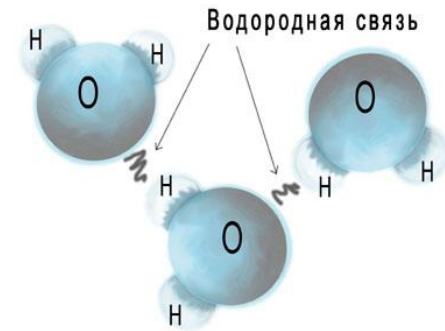
Пространственная модель молекулы воды

Водородные связи наблюдаются всегда, когда **водород Н** химически связан с одним электроотрицательным **О** (т.е. притягивающим электрон) атомом и при этом приближается к другому электроотрицательному атому **О**.



Водородные связи

Атомы водорода, соединённые ковалентной связью с сильно электроотрицательными атомами (O,N,F) всегда несут частичные положительные заряды и потому способны к образованию водородных связей.



Недостаточно электроотрицательный атом

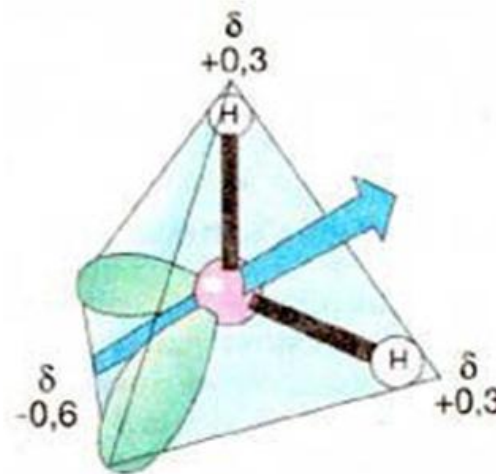
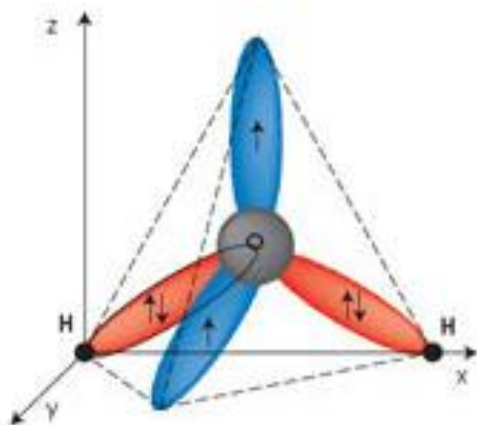


Полярность молекулы воды

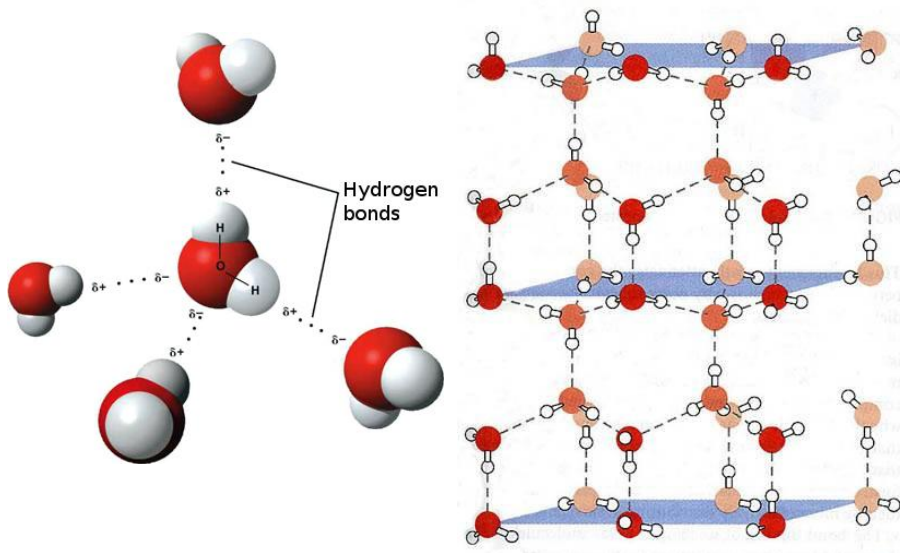
На атомах есть небольшие («парциальные») электрические заряды:
на электроотрицательном О – **отрицательный**
на Н – **положительный**.

Заряды на полярных атомах появляются в результате того, что электроотрицательные атомы **О** оттягивают электронные облака от соседних **Н**-атомов.
В результате на **Н**-атомах возникают небольшие положительные заряды, а на **О** – отрицательный заряд.

Т.к. частичные отрицательный и положительный заряды пространственно разделены, это приводит к возникновению **электрического дипольного момента**.



Пространственная модель молекулы воды



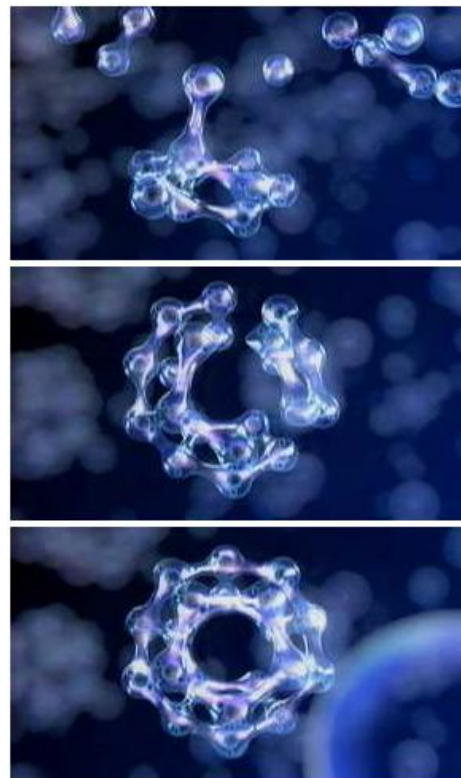
Поскольку расположение электронов вокруг атома кислорода близко к тетраэдрическому, каждая молекула воды в принципе может образовать водородные связи максимально с **четырьмя** соседними молекулами воды – это наблюдается во льду

В жидкой фазе молекула воды образует водородные связи в среднем с 3,4 других молекул.

Время полужизни водородной связи $\approx 1 \cdot 10^{-9}$ с.

Жидкая вода не вязкая, а весьма подвижная

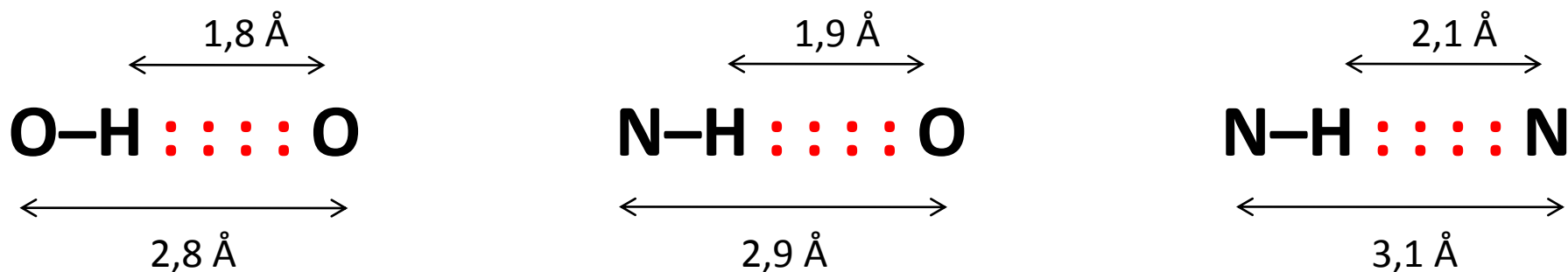
Короткоживущие группы молекул «мерцающие скопления» (flickering clusters)



Дистанция водородной связи

Электронное облако при Н-атоме – самое слабое, и оно сильно сминается при притяжении парциального положительного заряда Н к парциальному отрицательному заряду О (или N) атома.

В результате ядро Н подходит к ядру О (или N) не на 2,35-2,75 Å (как было бы при Ван-дер-Ваальсовом взаимодействии), а заметно ближе – на 1,8-2,1 Å.

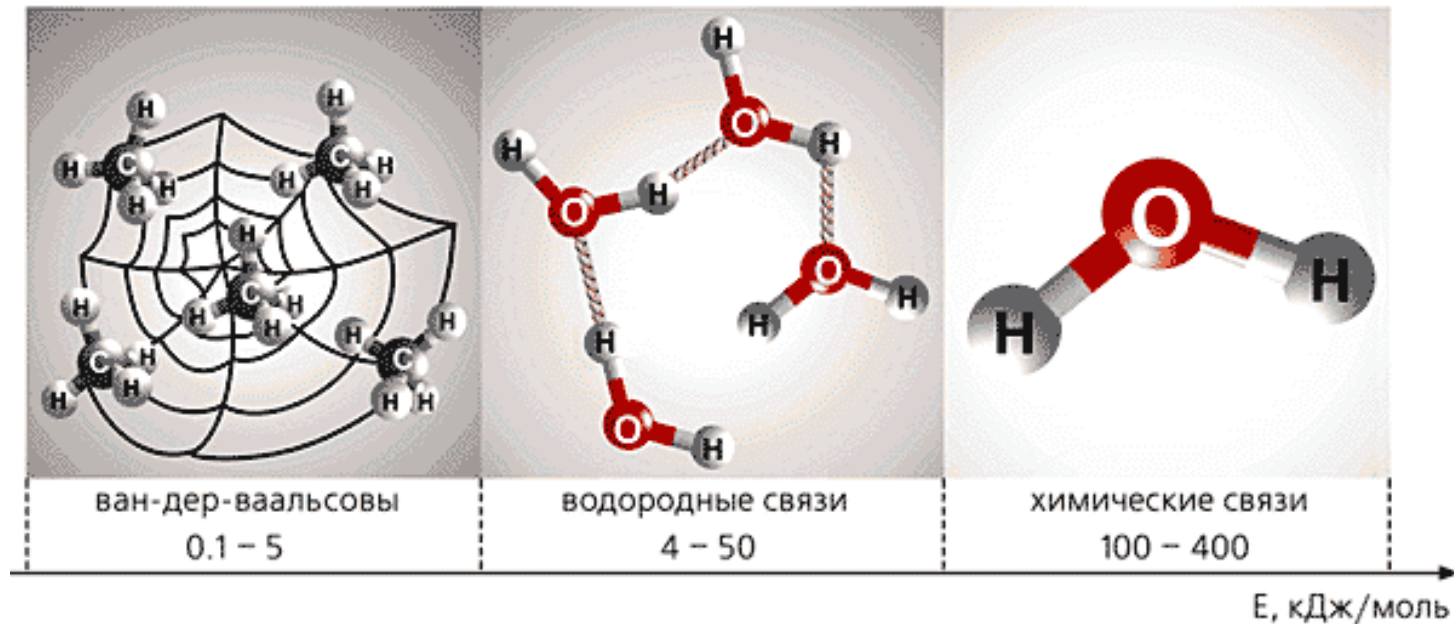


Эти данные получены из кристаллов малых молекул.

Энергия водородной связи

Отличительная черта водородной связи — сравнительно низкая ее энергия, она почти на порядок ниже энергии химической связи и занимает промежуточное положение между химическими связями и вандерваальсовыми взаимодействиями, которые удерживают молекулы в твердой или жидкой фазе.

Особенность водородной связи, по которым ее выделяют в отдельный вид, является ее **высокая прочность**.



Энергия водородной связи

$E = 5$ ккал/моль (20 кДж/моль)

Обычно лежит в пределах $10 \div 30$ кДж/моль

Оценка:

Теплота испарения диметилэфира $\text{H}_3\text{C} - \text{O} - \text{C H}_3$ = 5 ккал/моль

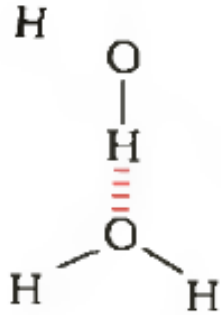
Теплота испарения спирта $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{O H}$ = 10 ккал/моль

Вещества состоят из одних и тех же атомов – Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия практически одинаковы.

Однако спирт может завязывать водородную связь (есть OH-группа), а диметилэфир – нет. Каждая OH-группа может быть донором только одной H-связи, атом O – акцептор. В спирте приходится по одной H-связи на молекулу.

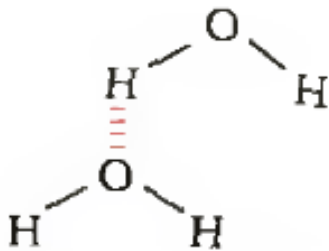
Цена одной водородной связи: 10 ккал/моль (спирт) – 5 ккал/моль (эфир) = **5 ккал/моль**

Направленность водородной связи



Сильная водородная связь

Верхняя структура характеризуется более прочной водородной связью, поскольку при такой ориентации взаимодействующих молекул обеспечивается максимально возможное притяжение между частичными электрическими зарядами.



Слабая водородная связь

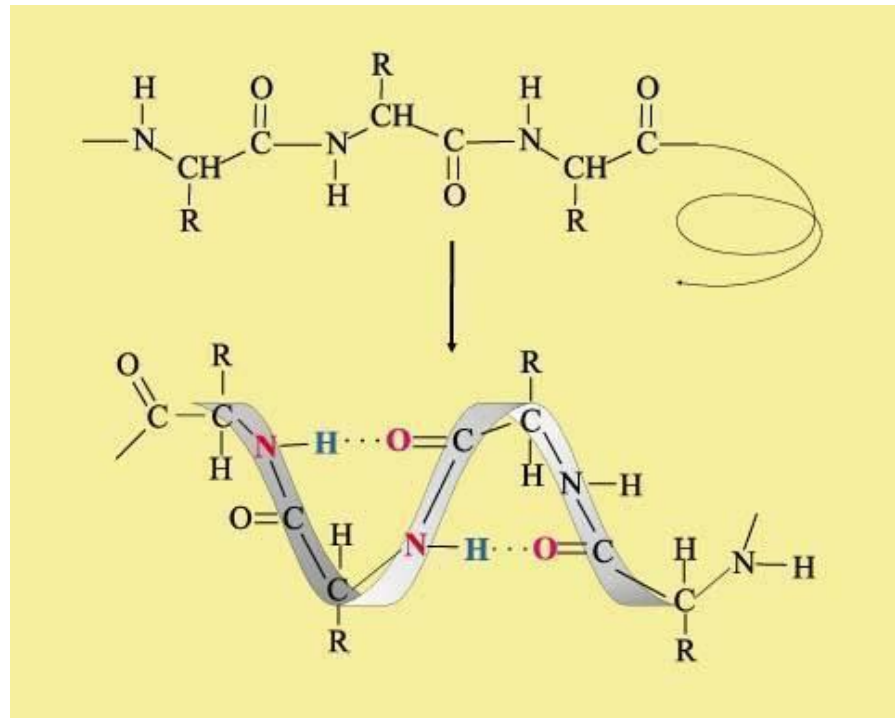
Именно это свойство водородных связей способствует *стабилизации строго определённых пространственных структур*, характерных для молекул белков и нуклеиновых кислот.

Водородная связь в биологических системах

Объединение параллельно уложенных полимерных цепочек в белках.

Н-связи предоставляют белковым молекулам способ упаковки – в виде спирали.

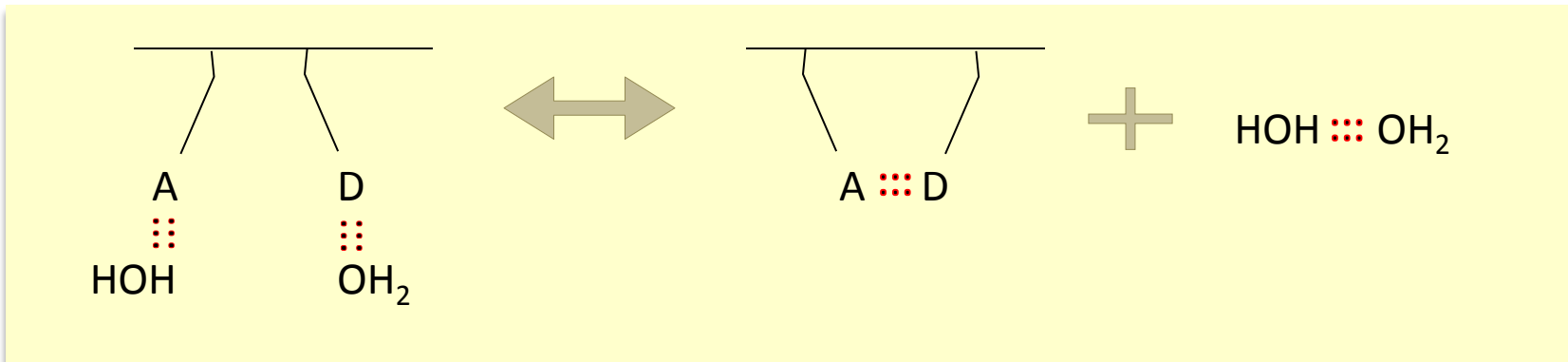
Витки спирали закреплены водородными связями, возникающими между карбонильной $>C=O$ и аминогруппой $-N-H$:



Водородная связь в биологических системах

Пептидные группы главной цепи и полярные боковые группы выступают донором и акцептором водородных связей. Они могут завязывать водородные связи друг с другом или с молекулами воды – и практически все они завязывают такие связи.

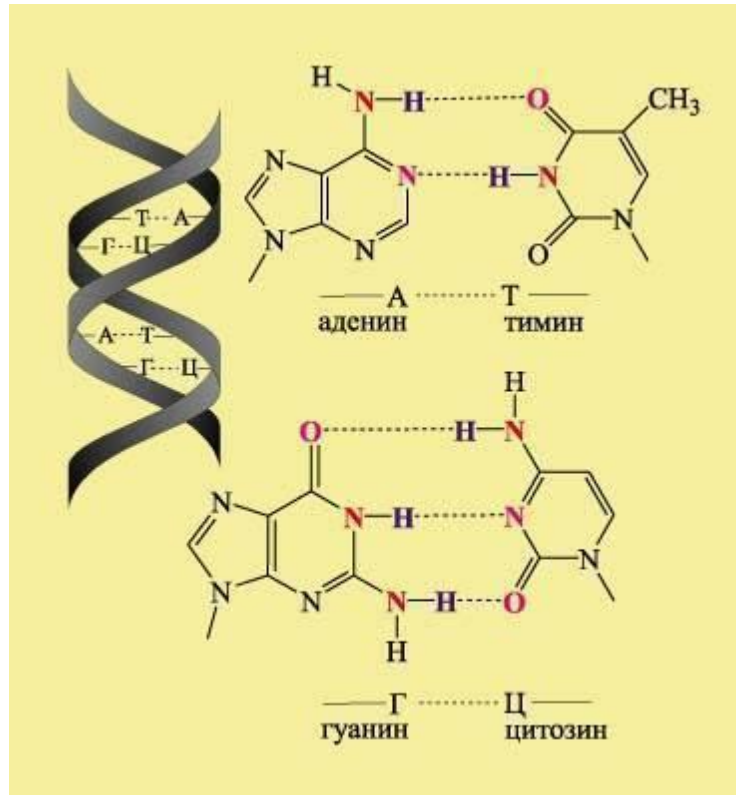
Если внутримолекулярная связь между донором D и акцептором A водородной связи в белке завязывается в водном окружении, то эта связь замещает две водородные связи белка с молекулами воды (которые были до того); и при этом ещё создаётся одна связь между оторвавшимися молекулами воды:



Энергетический баланс этой реакции близок к нулю: две Н-связи было, две стало. Однако **энтропия воды возрастает**, т.к. вода больше не привязана к белковой цепи и связанные Н-связью молекулы могут плавать где хочется.

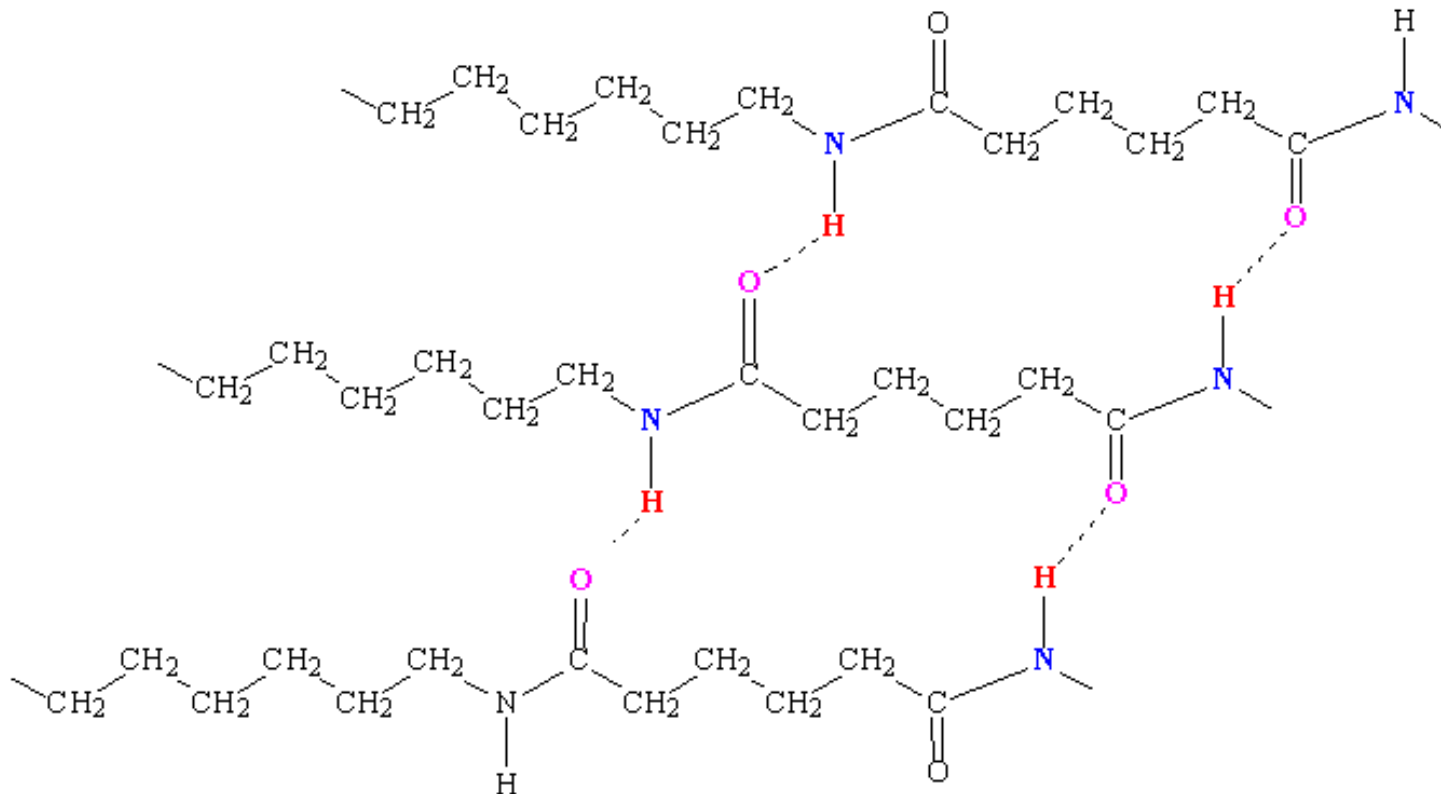
Водородная связь в биологических системах

При парном взаимодействии карбонильных $>C=O$ и аминогрупп $-N-H$, а также аминогрупп $-N-H$ и атомов азота N , не содержащих водород, возникают H -связи, которые удерживают две молекулы ДНК в форме двойной спирали:



Водородная связь в биологических системах

В полиамидах (капрон, нейлон) Н-связи возникают между *карбонильными* и *аминогруппами* $>C=O \cdots H-N<$, расположенными в соседних полимерных цепях. Это приводит к образованию кристаллических областей в структуре полимера и увеличению его механической прочности.



Водородная связь в биологических системах

Водородные связи позволяют полимерным цепям соединяться в *специфические трехмерные структуры*, приобретающие при этом *функциональную биологическую активность*.

Такие структуры, с одной стороны *достаточно прочные* (за счет образования большого числа водородных связей), а с другой - *достаточно чутко реагирующие* на изменение внешних условий (например, приближение той или иной молекулы) именно из-за того, что эти взаимодействия являются слабыми.

Разрыв таких связей лишает белки или нуклеиновые кислоты их биологических функций. Отсюда, видна исключительно важная роль водородных связей, которую они играют в биологических процессах на молекулярном уровне.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Ленинджер А. Основы биохимии: В 3-х т. Т.1. Пер. с англ. – М.: Мир, 1985. – 367.
2. Финкельштейн А. В., Птицын О. Б. Физика белка – 3-е изд. – М., КДУ, 2005. – 456 с.
3. Статьи Соросовского Образовательного журнала в текстовом формате.
Водородная связь: как ее понимать (Степанов Н.Ф. , 2001), ХИМИЯ
(<http://www.pereplet.ru/obrazovanie/stsoros/719.html>)
4. <http://o8ode.ru>
5. <http://www.krugosvet.ru/>