

Extraordinary properties of Water



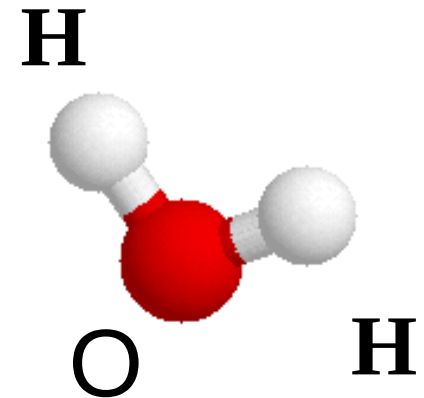
물의 중요성

- 세포의 형태 유지
- 혈액과 조직액의 순환 원활
- 노폐물 체외 배설
- 체온 조절



물의 성질

1. 물은 극성을 띤다.
2. 물은 용매로 작용한다.
3. 물은 수소결합을 형성한다.
4. 물은 체온을 조절한다.
5. 물은 산과 염기로 작용한다

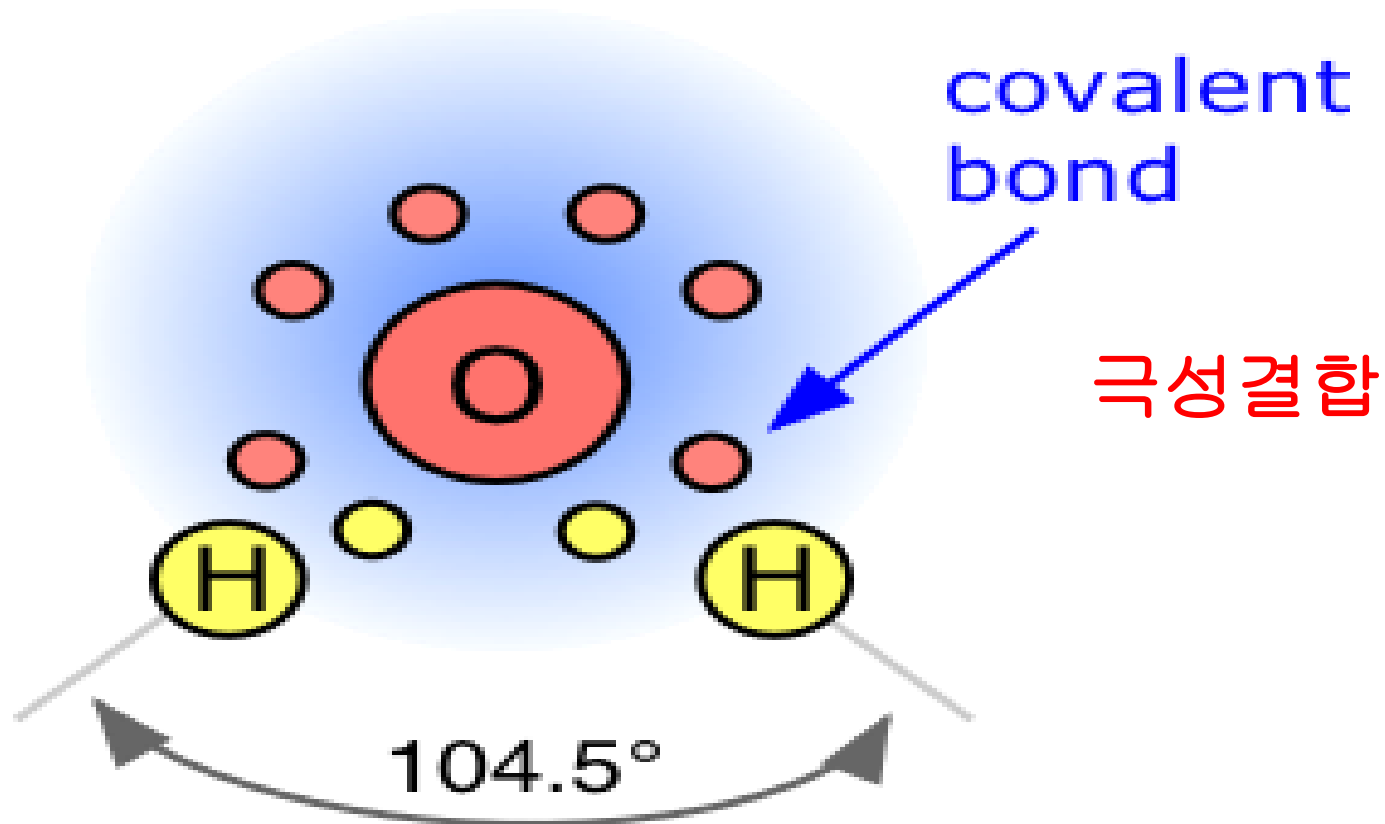


물의 성질1

- 극성 (polar nature)

Polar: 원자의 결합 시 전자가 균등하게
배분되지 않아서
원자간의 전기음성도 차이

물의 기하학적 구조



극성이란 왜 생기는 걸까?

- 전기음성도가 다른 원자가 결합하면
전자가 균등하게 배분되지 않아
(전자의 분포가 비대칭적으로 분산되어)
부분적인 음전하와 양전하를 띠게 된다.
→ 극성 (polar) 발생

전기음성도

- 원자가 전자를 자기 쪽으로 끌어당기는 경향

Table 2.1

Electronegativities of Selected Elements

Element

Electronegativity*

Oxygen

3.5

Nitrogen

3.0

Sulfur

2.6

Carbon

2.5

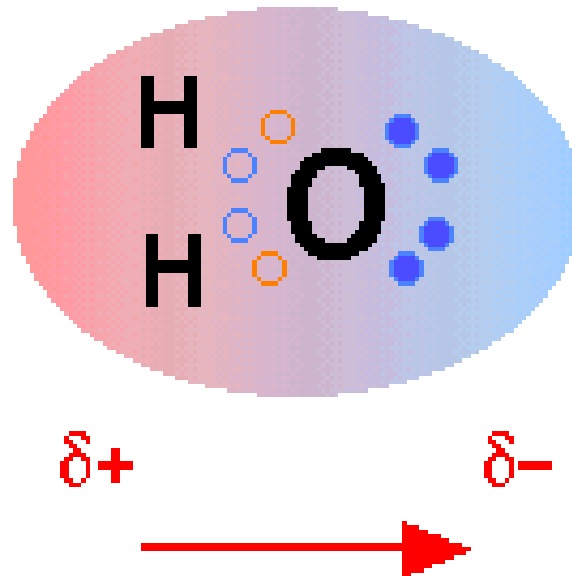
Phosphorus

2.2

Hydrogen

2.1

- The uneven charge distribution is called electric **dipole**.(쌍극자)



This causes the water molecule to be polar.

Nonpolar (비극성)

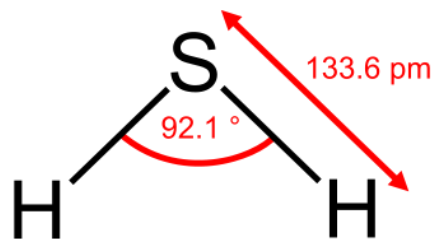
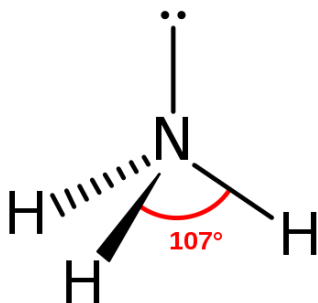
- sharing of e^- in the bond is equal
(CH_4)
- 기하학적 구조가 대칭적인 경우
이산화탄소 $\text{O}=\text{C}=\text{O}$ (CO_2)

다음 중 극성물질인 것은?

- 에탄 (C_2H_6)
- 프로판 (C_3H_8)
- $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (알코올)

Polarity of gases

Gases	Polarity
Nitrogen	Nonpolar
Oxygen	Nonpolar
Carbon dioxide	Nonpolar
Ammonia	Polar
Hydrogen sulfide(H ₂ S)	Polar



혈액에서 산소와 이산화탄소의 운반

- 산소 운반:
 - 헤모글로빈이 운반체
 - water soluble “carrier proteins”
- 이산화탄소 운반:
 - hemoglobin이 운반체

물의성질 2.

물은 용매로 작용한다.

Water as Universal Solvent for Life

Solution (용액)

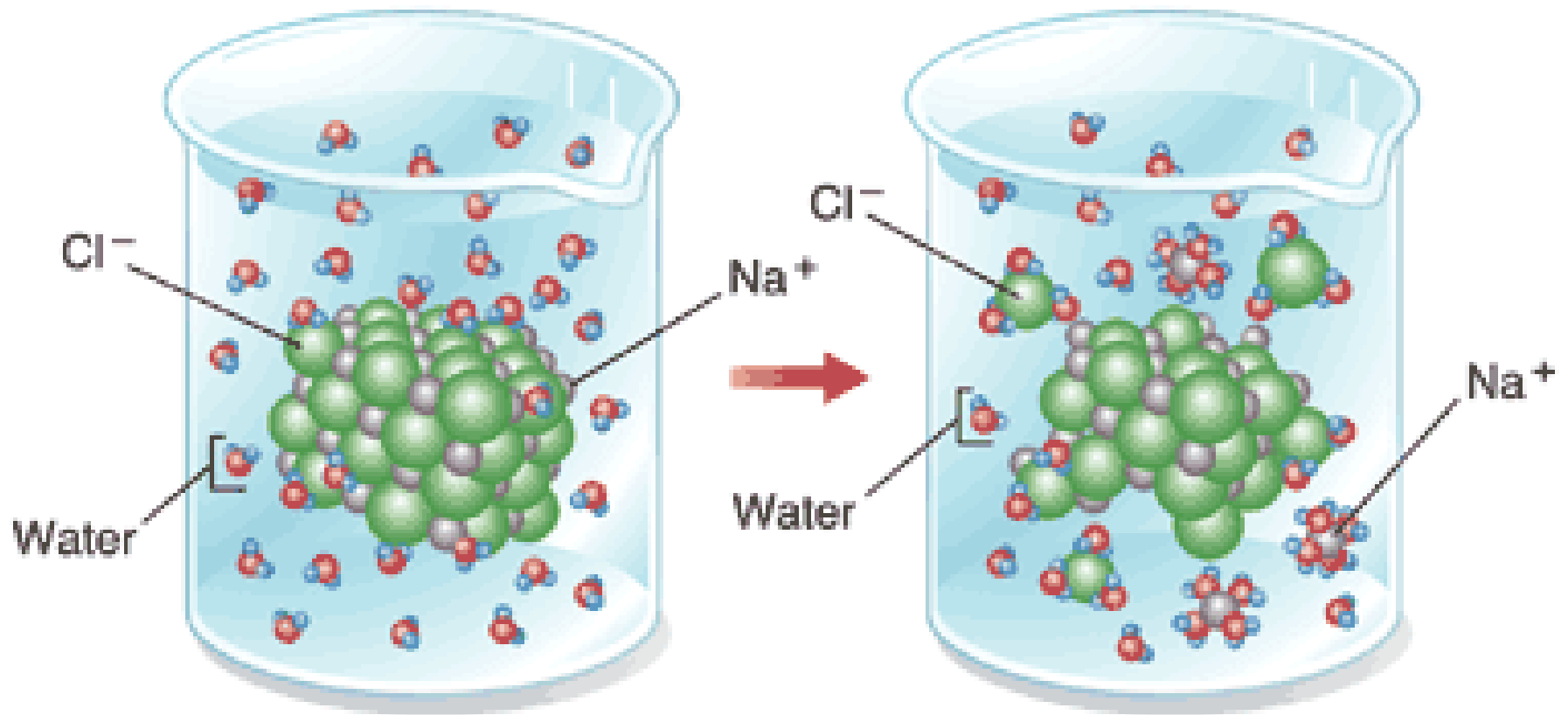
SOLUTE (용질)

- Substance that is being dissolved.
- 녹아있는 물질

SOLVENT (용매)

- Substance into which the solute is dissolved.
- 녹이는 물질

Solution



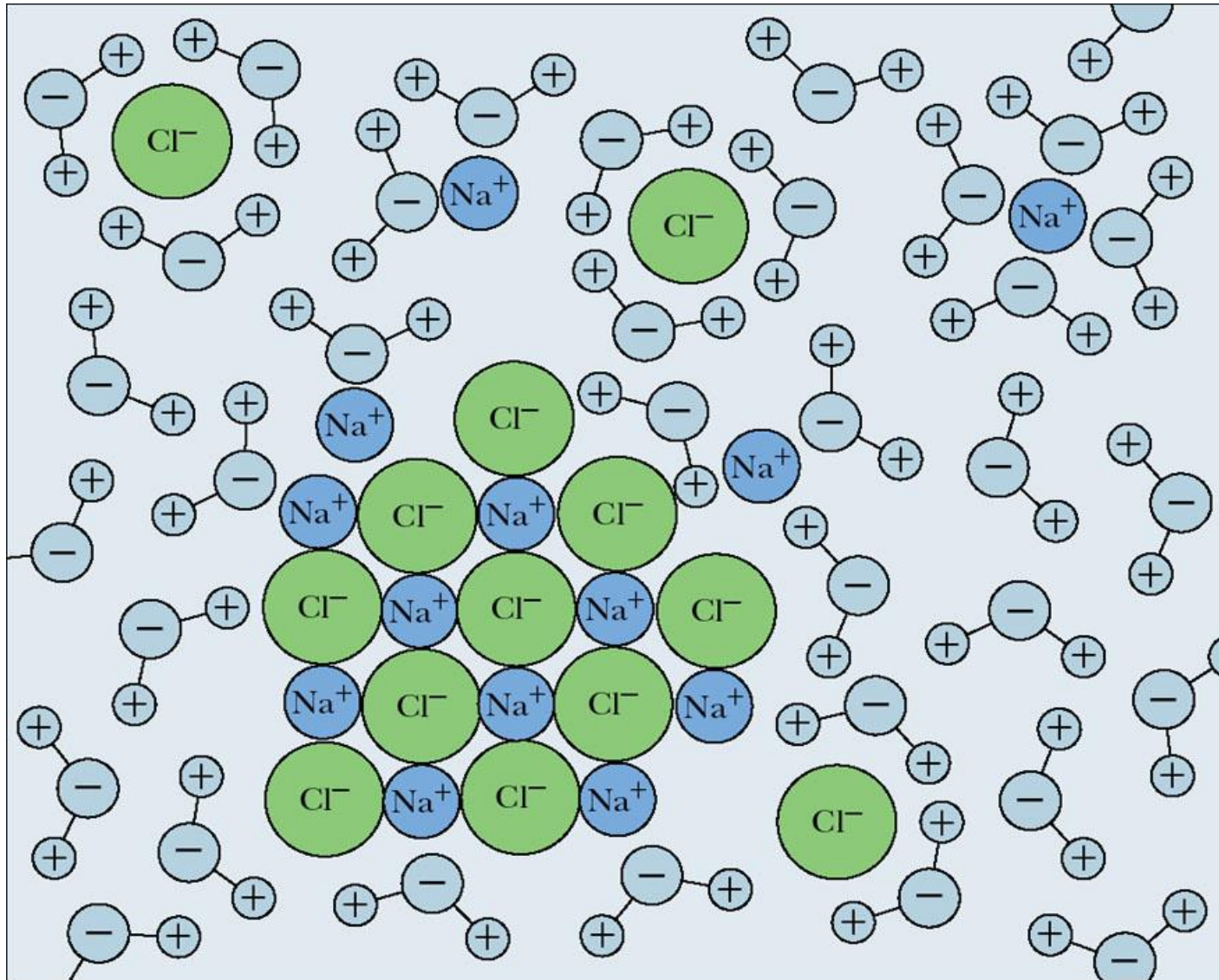
Solute: ???

Solvent: ???

물에 녹는 물질과 녹지 않는 물질

- 물은 극성을 띠므로 극성을 지닌 물질은 물에 녹는다.
- 이온화되는 화합물과 부분적 전하를 띤 물질은 물에 잘 녹는다.
 - NaCl, KCl
 - Carboxylic acid ($-\text{COO}^-$)
 - Ketone ($\text{C}=\text{O}$)

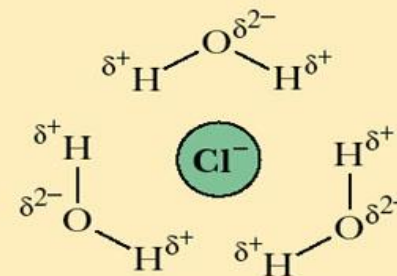
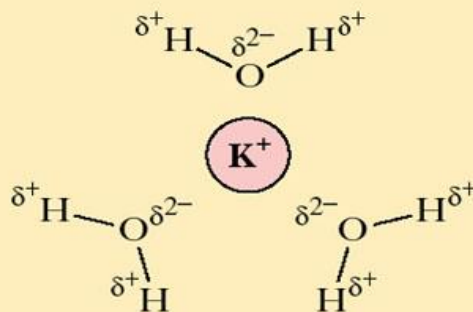
Hydration shells surrounding ions in solution (정전기적결합)



정전기적결합 (Ion-dipole and dipole-dipole interactions)

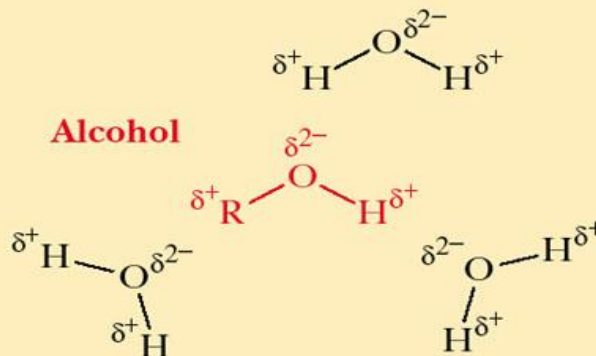
Ion-dipole

(a)

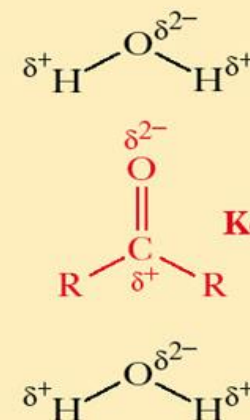


(b)

Alcohol



Ketone



용질의 분류

- Hydrophilic (친수적): 물을 좋아하는
알코올, 케톤, 아미노산, 인산, 염류
- Hydrophobic (소수적): 물을 싫어하는
dissolve freely in nonpolar solvents like
benzene and chloroform.
지방, 콜레스테롤

Quiz. 다음 중 물에 잘 녹는 것은?

1. 포도당
2. 술
3. 콩기름
4. 전분 (녹말)

기름은 왜 물에 녹지 않는가?

기름은 물 위에 뜬다.

비극성물질은 물에 녹지 않는다.

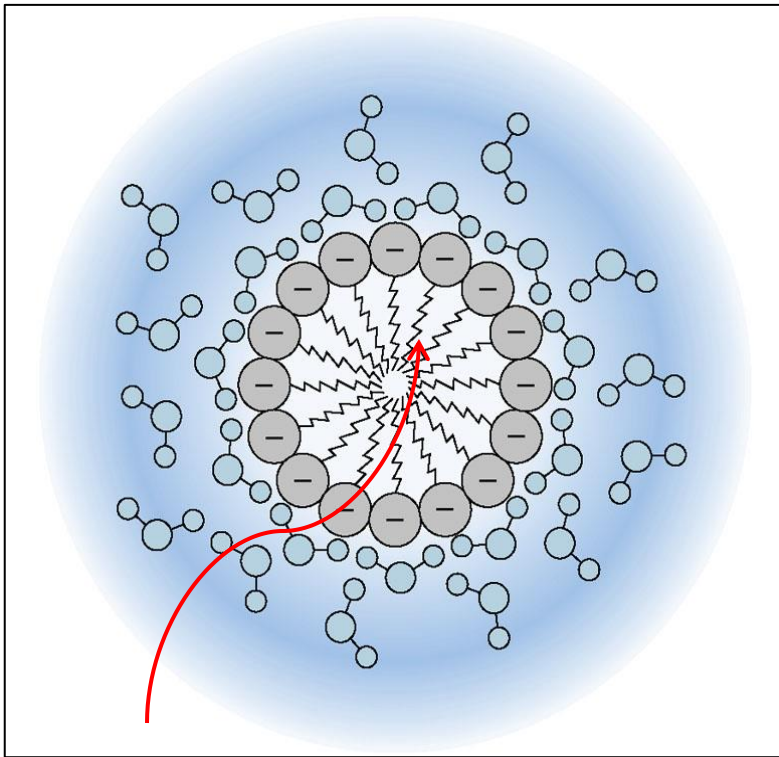
이유: 물 분자 간의 강한 수소결합이
기름분자를 밀어낸다 → 소수성 상호작용
혹은 소수성 결합이라 한다

유화 (emulsion)

물과 기름이 어울린 상태

계면활성제 필요

액체가 반고체상태로 전환



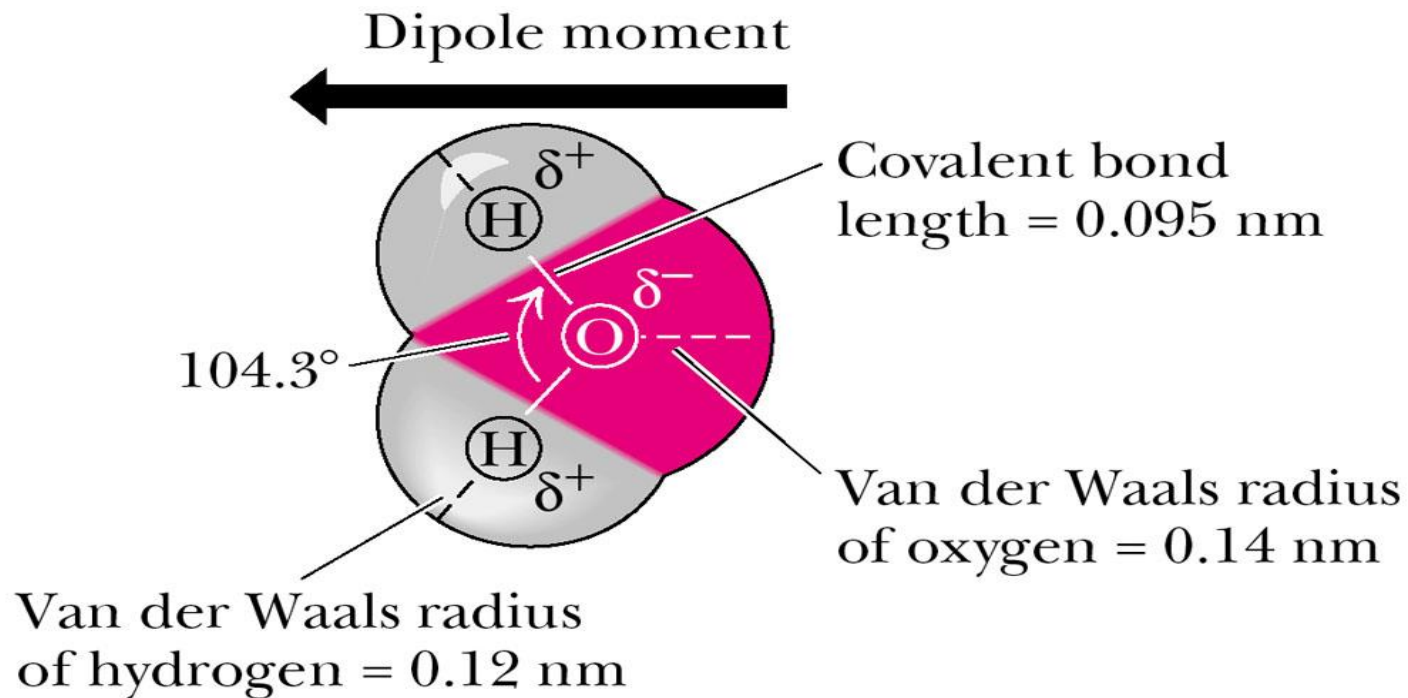
반데르발스 결합, 소수성결합

- 마요네즈
- O/W 유탕액
(oil in water emulsion)
- 물 속에 기름이
분산되어 있는 형태



van der waals interactions

- When two uncharged atoms are brought close together, their surrounding electron clouds influence each other.

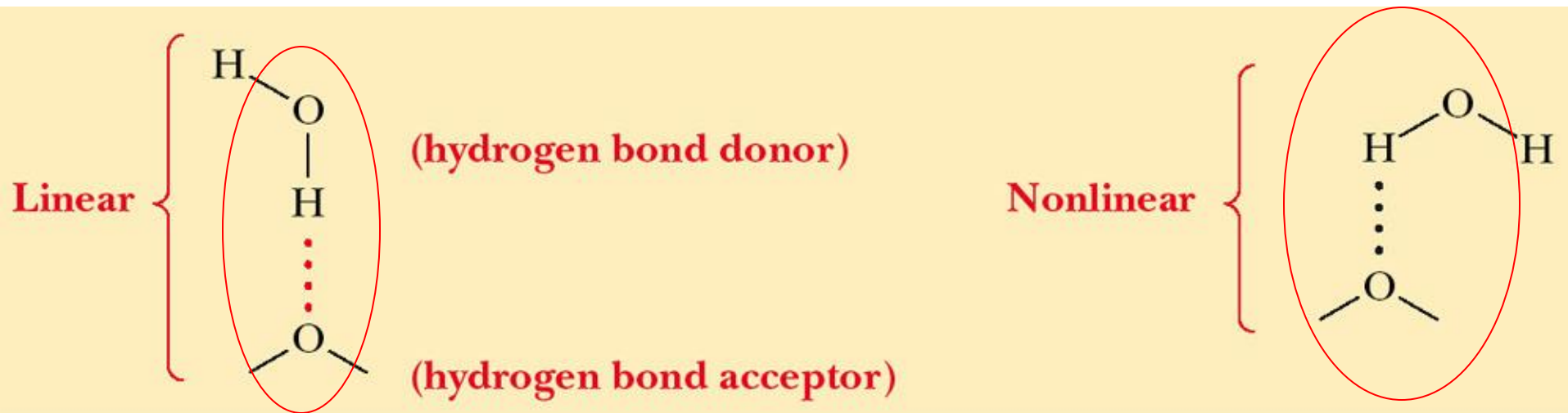


결합의 종류: 공유결합과 비공유결합

- 공유결합: 원자들간에 전자의 공유(Sharing)에 의해 화합물을 만드는 원자간의 화학결합
- 비공유결합: 원자들간에 화학적, 혹은 물리적 끌림에 의해 (일시적으로) 생기는 결합
 - 수소결합
 - 이온- **dipole** 결합
 - 소수성결합
 - 반데르발스결합

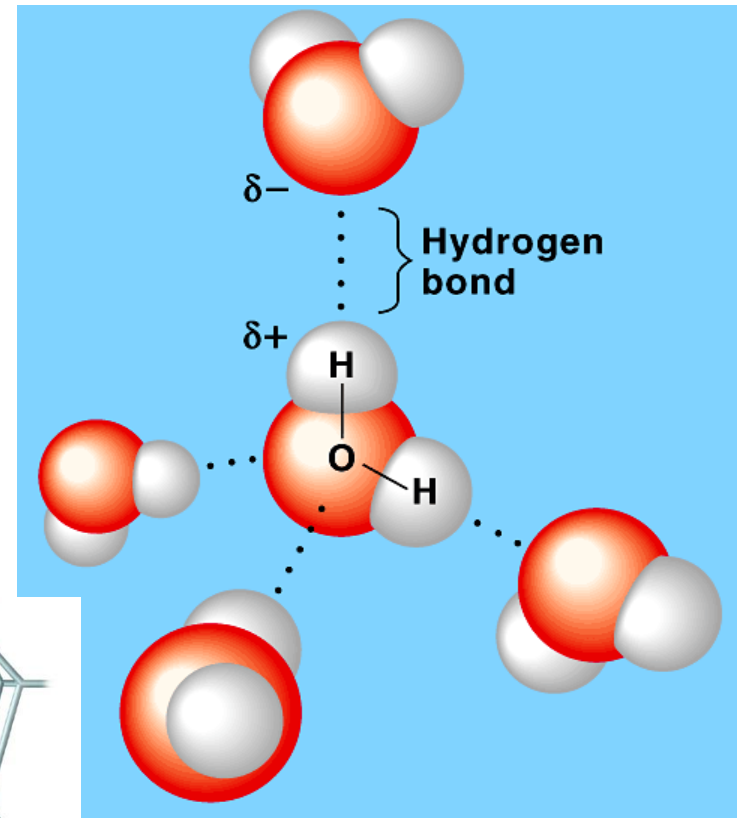
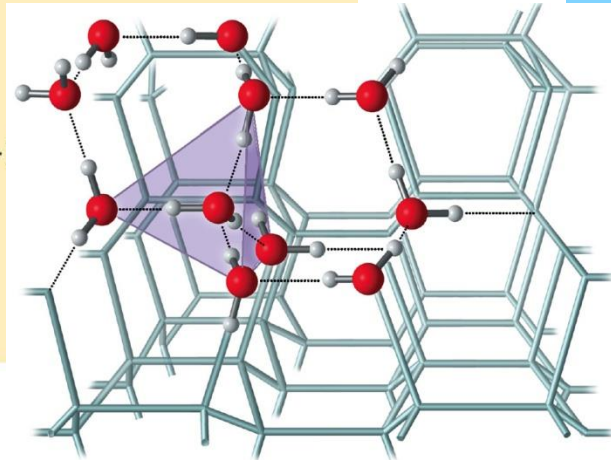
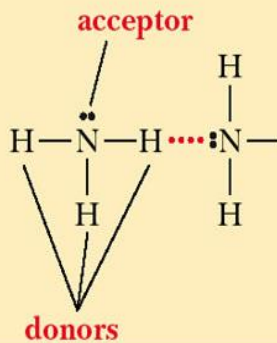
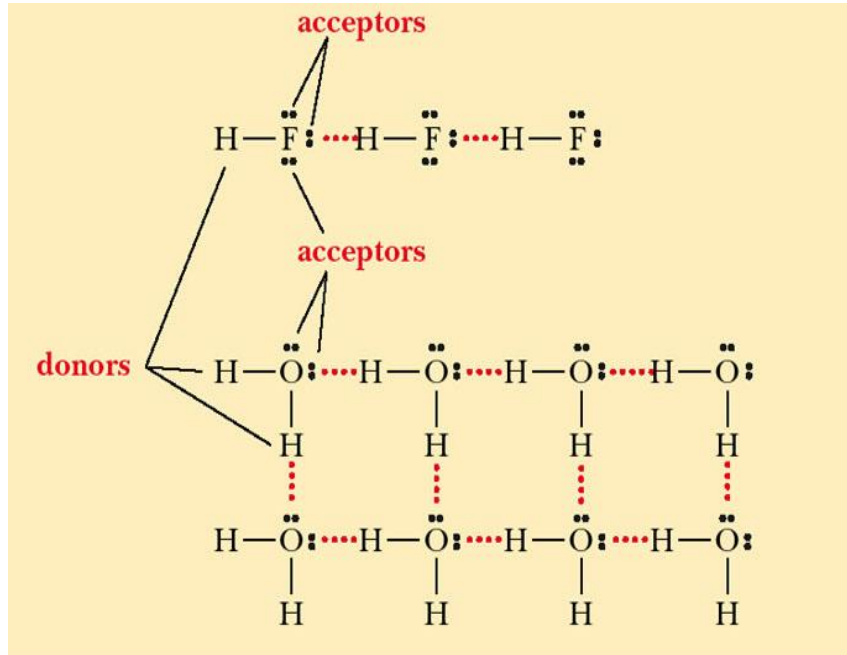
물의 성질 3. 물 분자는 수소결합을 만든다.

산소나 질소에 공유결합되어 있는 수소는 양전하를 띠어 음전하를 띤 다른 원소의 전자에 접근하여 상호작용한다.



- 공여체 (donor)
- 수용체 (acceptor)

Each water molecule can form 4 hydrogen bonds.

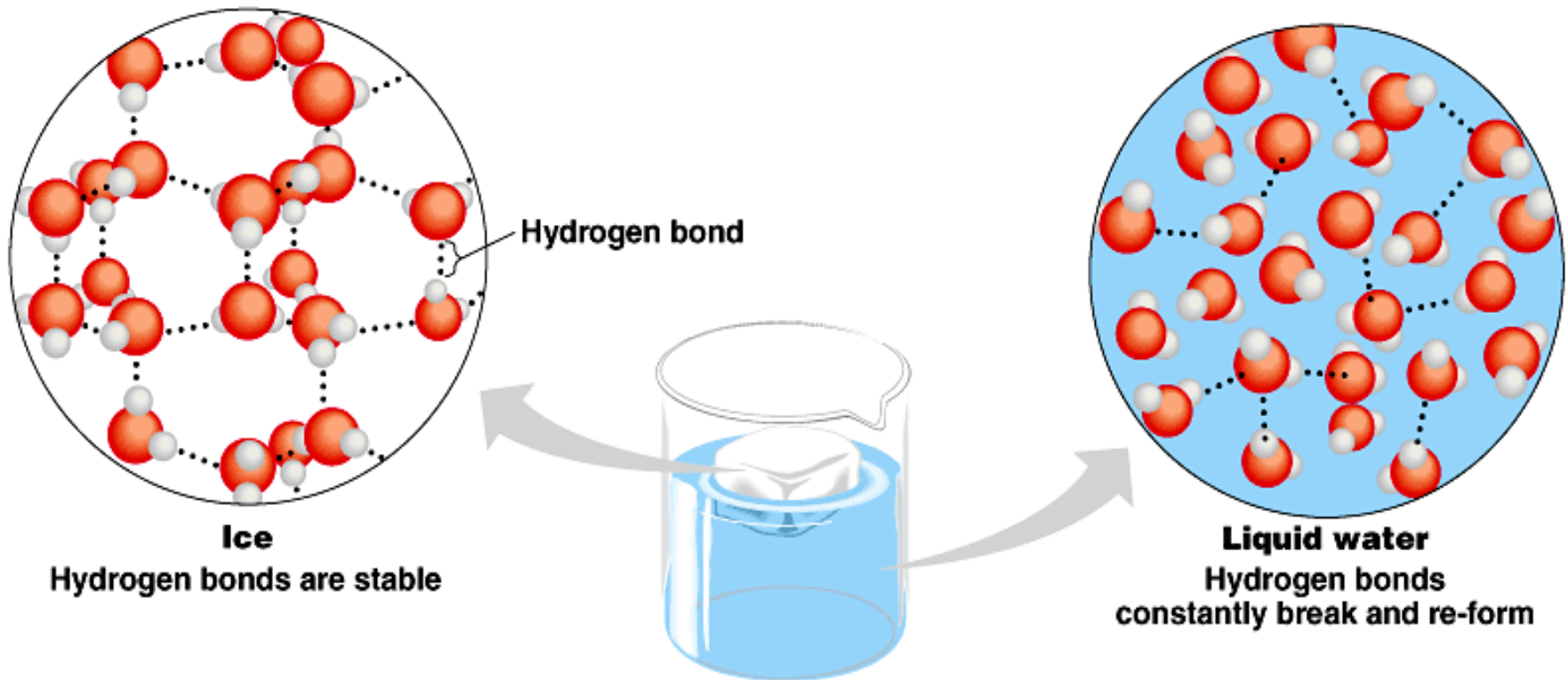


Density of Water (물의 밀도)는 변화한다.

- Ice is 10% less dense as a solid than as a liquid

→ 얼음이 물위에 뜨는 이유

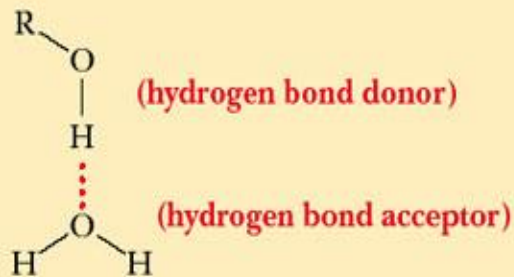
→ 맥주병을 냉동실에 두면 터지는 이유



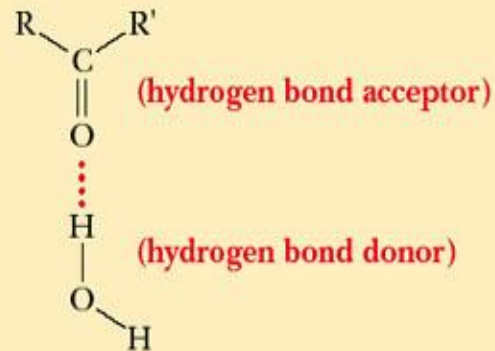
수소결합의 다양한 예

Hydrogen bonding between polar groups and water

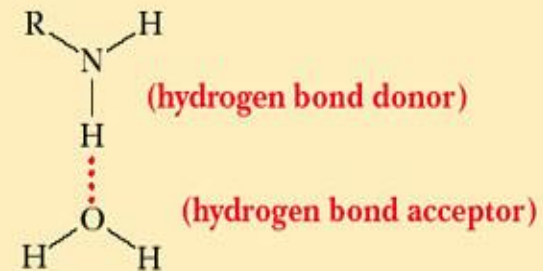
Between a hydroxyl group
of an alcohol and H₂O



Between a carbonyl group
of a ketone and H₂O



Between an amino group
of an amine and H₂O



다양한 수소결합의 예

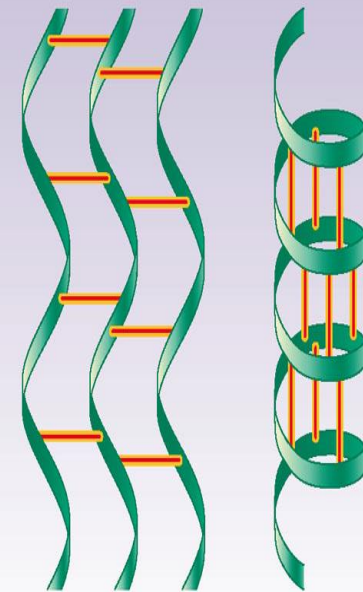
Table 2.5

Examples of Major Types of Hydrogen Bonds Found in Biologically Important Molecules

Bonding Arrangement	Molecules Where the Bond Occurs
$\text{—O—H} \cdots \text{O—}$ $\quad \quad \quad \text{H}$	H bond formed in H_2O
$\text{—O—H} \cdots \text{O}=\text{C} \diagup \diagdown$	Bonding of water to other molecules
$\text{N—H} \cdots \text{O—}$ $\quad \quad \quad \text{H}$	Important in protein and nucleic acid structures
$\text{N—H} \cdots \text{O}=\text{C} \diagup \diagdown$	
$\text{N—H} \cdots \text{N} \diagup \diagdown$	
$\text{N—H} \cdots \text{N} \text{ (in a ring structure)}$	

© 2006 Brooks/Cole - Thomson

Types of hydrogen bonding in proteins



Interstrand

Intrastrand

Hydrogen bonds between the strands of a DNA double helix



Interstrand

— = H bond

© 2006 Brooks/Cole - Thomson

공유결합과 비공유결합의 결합에너지 비교

Table 2.3

Some Bond Energies

	Type of Bond	Energy*	
		(kJ mol ⁻¹)	(kcal mol ⁻¹)
Covalent Bonds (Strong)	O—H	460	110
	H—H	416	100
	C—H	413	105
Nonovalent Bonds (Weaker)	Hydrogen bond	20	5
	Ion–dipole interaction	20	5
	Hydrophobic interaction	4–12	1–3
	Van der Waals interactions	4	1

물의 끓는점이 높은 이유는 물 분자 간의 수많은 수소결합 때문이다

Table 2.4

Comparison of Properties of Water, Ammonia, and Methane

Substance	Molecular Weight	Melting Point (°C)	Boiling Point (°C)
Water (H ₂ O)	18.02	0.0	100.0
Ammonia (NH ₃)	17.03	-77.7	-33.4
Methane (CH ₄)	16.04	-182.5	-161.5

물의 성질 4. 물은 체온을 조절한다

- 물은 열용량이 높아 체온 조절이 용이하다.

열용량: 온도를 **1C** 변화시키기 위해 첨가
또는 제거해야 하는 에너지

- 성인은 하루 **1.2 L**의 물을 배설하여 열을 손실한다.

요약

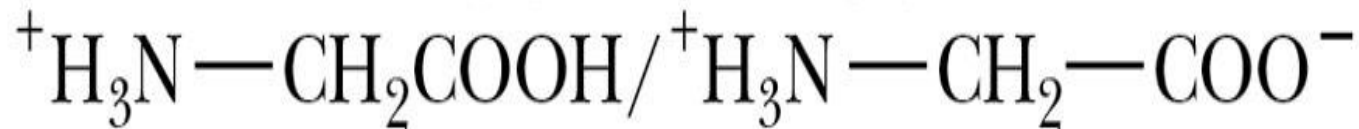
- 수소결합은 쌍극자-쌍극자 결합이다
- 물분자는 광범위하게 수소결합되어 있다.
- 단백질과 핵산의 3차원 구조는 수소결합에 의해 안정화된다.

물의 성질 5. 물은 산과 염기로 작용한다.

What Are Acids (산) and Bases(염기) ?

- Acids are proton donors
- bases are proton acceptors.
- $HA \rightleftharpoons H^+ + A^-$
산 짝염기
- $HA + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + A^-$
산 염기 짝산 짝염기

(문제) 산과 염기를 구별해 보세요



Acid dissociation constant, K_a (산 해리상수)

- $$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

산의 강도를 나타내는 수치

예: K_a 가 10^{-4} , 10^{-7} 인 약산이 있다.

이 중 산의 강도가 높은 것은 ?

Ka와 pKa

- $$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

- $$-\log_{10} K_a = pK_a$$

예: K_a 가 10^{-4}

$$\frac{1[H^+] \times 1[A^-]}{10^4[HA]} = 1/10,000 \text{ 전리}$$

$$K_a \text{가 } 10^{-7} \text{ 인 산은} \rightarrow 1/1,000,000 \text{ 전리}$$

- 그러므로 K_a 가 10^{-4} 인 산이 10^{-7} 보다 전리하려는 성질이 강하다.

→ 각각의 pK_a 을 구하면 pK_a 4와 pK_a 7이 된다.

→ 따라서 pK_a 값이 작을수록 강한 산이 된다.

약산의 pKa

Table 2.6

Dissociation Constants of Some Acids

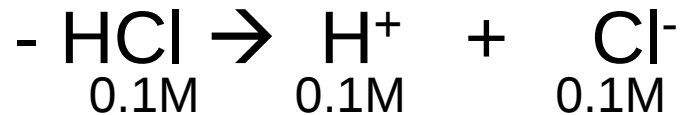
Acid	HA	A ⁻	K _a	pK _a
Pyruvic acid	CH ₃ COCOOH	CH ₃ COCOO ⁻	3.16×10^{-3}	2.50
Formic acid	HCOOH	HCOO ⁻	1.78×10^{-4}	3.75
Lactic acid	CH ₃ CHOHCOOH	CH ₃ CHOHCOO ⁻	1.38×10^{-4}	3.86
Benzoic acid	C ₆ H ₅ COOH	C ₆ H ₅ COO ⁻	6.46×10^{-5}	4.19
Acetic acid	CH ₃ COOH	CH ₃ COO ⁻	1.76×10^{-5}	4.76
Ammonium ion	NH ₄ ⁺	NH ₃	5.6×10^{-10}	9.25
Oxalic acid (1)	HOOC—COOH	HOOC—COO ⁻	5.9×10^{-2}	1.23
Oxalic acid (2)	HOOC—COO ⁻	⁻ OOC—COO ⁻	6.4×10^{-5}	4.19
Malonic acid (1)	HOOC—CH ₂ —COOH	HOOC—CH ₂ —COO ⁻	1.49×10^{-3}	2.83
Malonic acid (2)	HOOC—CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —COO ⁻	2.03×10^{-6}	5.69
Malic acid (1)	HOOC—CH ₂ —CHOH—COOH	HOOC—CH ₂ —CHOH—COO ⁻	3.98×10^{-4}	3.40
Malic acid (2)	HOOC—CH ₂ —CHOH—COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —CHOH—COO ⁻	5.5×10^{-6}	5.26
Succinic acid (1)	HOOC—CH ₂ —CH ₂ —COOH	HOOC—CH ₂ —CH ₂ —COO ⁻	6.17×10^{-5}	4.21
Succinic acid (2)	HOOC—CH ₂ —CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —CH ₂ —COO ⁻	2.3×10^{-6}	5.63
Carbonic acid (1)	H ₂ CO ₃	HCO ₃ ⁻	4.3×10^{-7}	6.37
Carbonic acid (2)	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ²⁻	5.6×10^{-11}	10.20
Citric acid (1)	HOOC—CH ₂ —C(OH) (COOH)—CH ₂ —COOH	HOOC—CH ₂ —C(OH) (COOH)—CH ₂ —COO ⁻	8.14×10^{-4}	3.09
Citric acid (2)	HOOC—CH ₂ —C(OH) (COOH)—CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —C(OH) (COOH) —CH ₂ —COO ⁻	1.78×10^{-5}	4.75
Citric acid (3)	⁻ OOC—CH ₂ —C(OH) (COOH) CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —C(OH) (COO ⁻)—CH ₂ —COO ⁻	3.9×10^{-6}	5.41
Phosphoric acid (1)	H ₃ PO ₄	H ₂ PO ₄ ⁻	7.25×10^{-3}	2.14
Phosphoric acid (2)	H ₂ PO ₄ ⁻	HPO ₄ ²⁻	6.31×10^{-8}	7.20
Phosphoric acid (3)	HPO ₄ ²⁻	PO ₄ ³⁻	3.98×10^{-13}	12.40

전해질: 물에 녹아 이온으로 쪼개져 전류가 흐르는 물질

- 강전해질

- 염산, 황산, 수산화나트륨 등

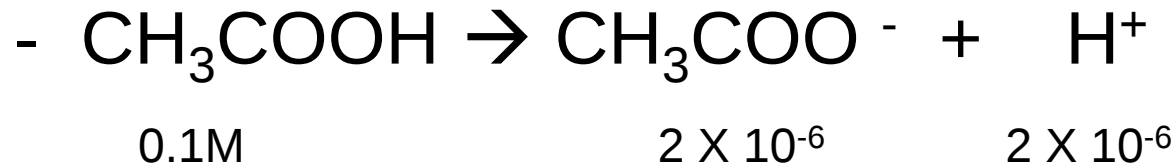
- 100% 전리



- 약전해질

- 초산, 인산, 탄산 등

- 10% 미만 전리



pH

용액 중 수소이온 농도의 마이너스 대수

$$\text{pH} = -\log_{10} [\text{H}^+]$$

예) $10^{-3} \text{ M HCl} \rightarrow [\text{H}^+] \text{ 가 } 10^{-3} \text{ M}$
그러므로 $\text{pH} = 3$

K_w (물의 이온적)

- $K_w = [H^+] [OH^-] = 10^{-14}$ 라 정의
- $-\log [H^+] [OH^-] = -\log 10^{-14}$
- $pH + pOH = 14$

Acid dissociation constant, K_a (산 해리상수)

- $$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

산의 강도를 나타내는 수치

예: K_a 가 10^{-4} , 10^{-7} 인 약산이 있다.

이 중 산의 강도가 높은 것은 ?

Henderson-Hasselbach equation

- 약산의 해리상수와 pH를 연관 짓는 방정식

$$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

양쪽에 $-\log$ 를 취하면

- $pH = pK_a + \log [공역염기]/[공역산]$
- 용액의 pH는 존재하는 공역산과 공역염기의 비율을 결정한다.

아세트산은 우리 몸에서 어떤 형태로 존재할까?

- CH_3COOH , $\text{pK}_a = 4.76$
- 우리 몸의 pH를 7이라고 하면

$$\text{pH} = \text{pK}_a + \log [\text{공역염기}]/[\text{공역산}]$$

$$\text{pH} = \text{pK}_a + \log [\text{CH}_3\text{COO}^-]/[\text{CH}_3\text{COOH}]$$

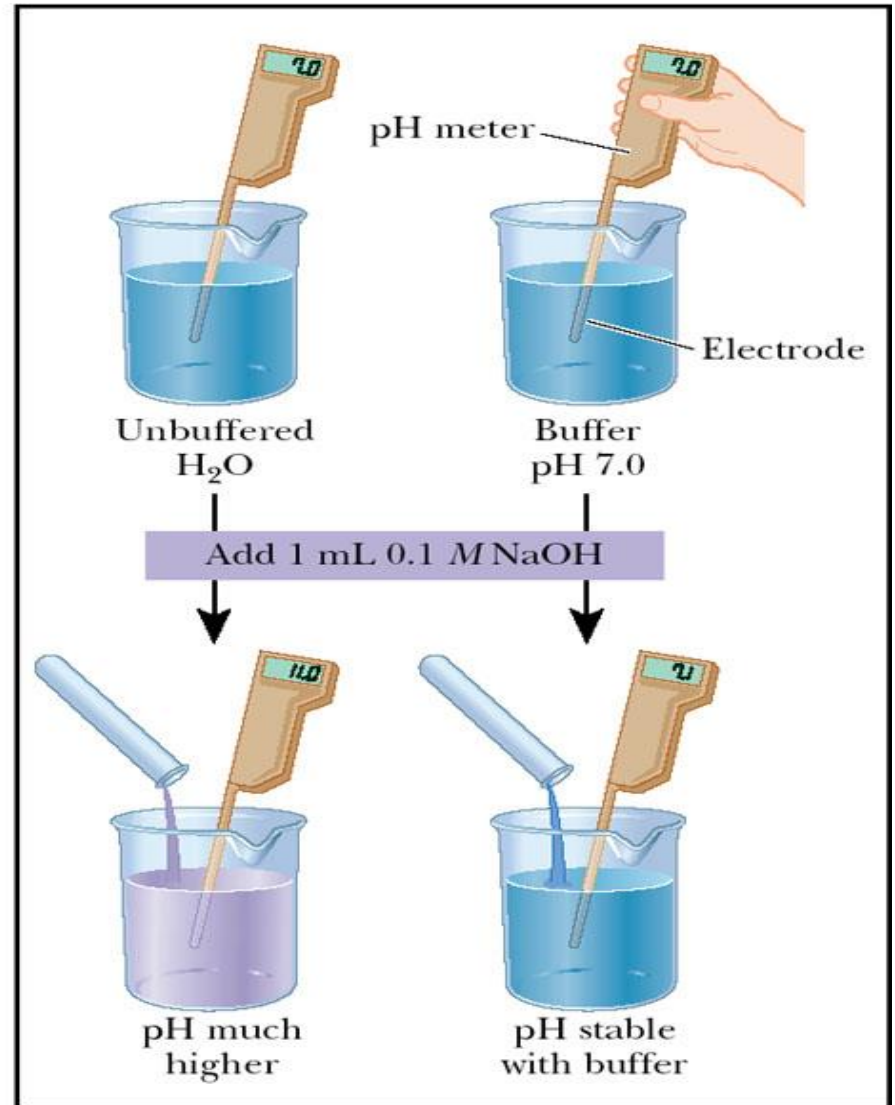
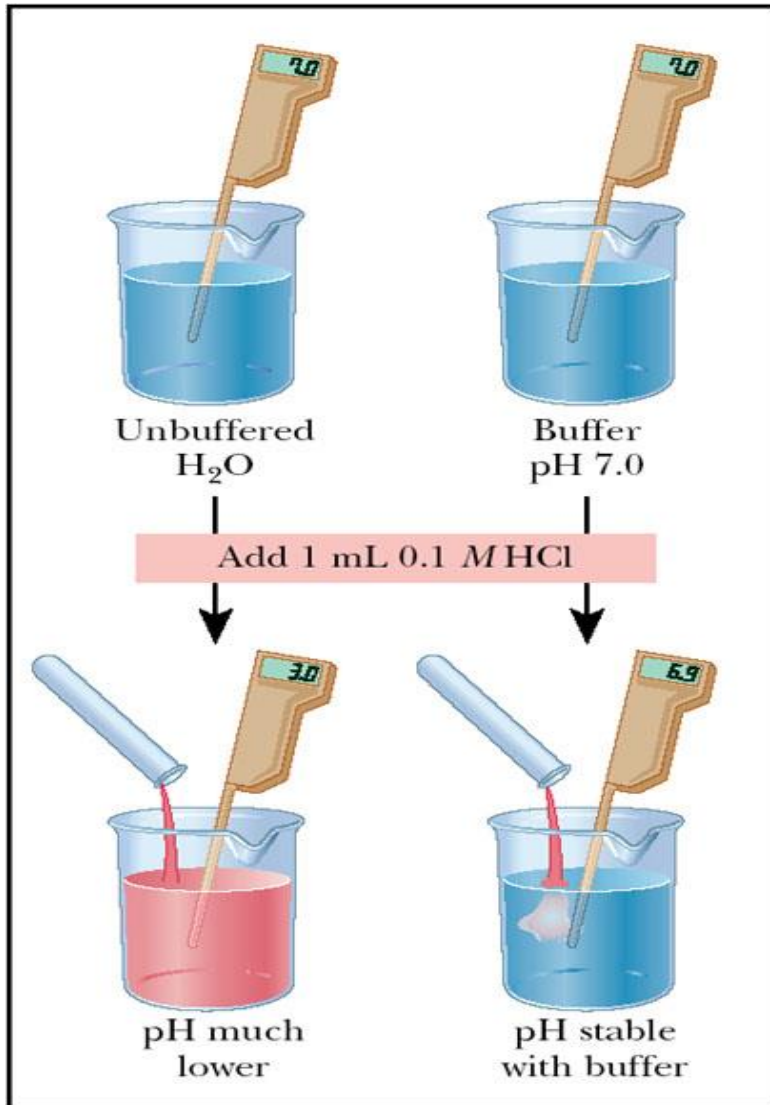
$$7 = 4.76 + \log [\text{CH}_3\text{COO}^-]/[\text{CH}_3\text{COOH}]$$

$$\log [\text{CH}_3\text{COO}^-]/[\text{CH}_3\text{COOH}] = 2.24$$

$$[\text{CH}_3\text{COO}^-]/[\text{CH}_3\text{COOH}] = 10^{2.24} = 174 = 174 / 1$$

따라서 우리 몸에서 초산은 CH_3COO^- 의 형태로 주로 존재한다.

완충작용과 pH의 변화에 관한 실험



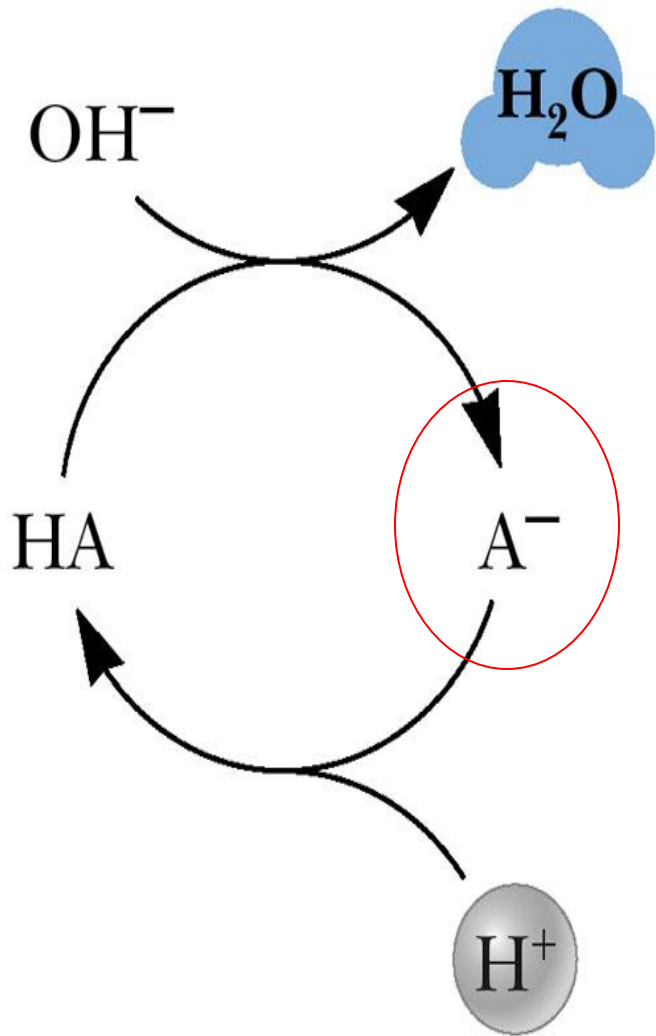
완충작용과 pH의 변화에 관한 실험

- 증류수 100ml (pH 7.0) 에 0.1M HCl 1ml을 가했을 때의 pH의 변화량은 ?
 - 완충용액 100ml (pH 7.0) 에 0.1M HCl 1ml을 가했을 때의 pH 변화량은 ?
- 완충용액이 HCl 에 의한 pH 변화를 억제하였다.

완충용액 (buffer)

- 적은 양의 산이나 염기의 첨가 시 pH가 크게 변하지 않는 용액
- 약산과 그 공역염기로 구성됨
- 초산완충용액은 초산과 초산나트륨을 혼합하여 만들어진다.

Buffer action:

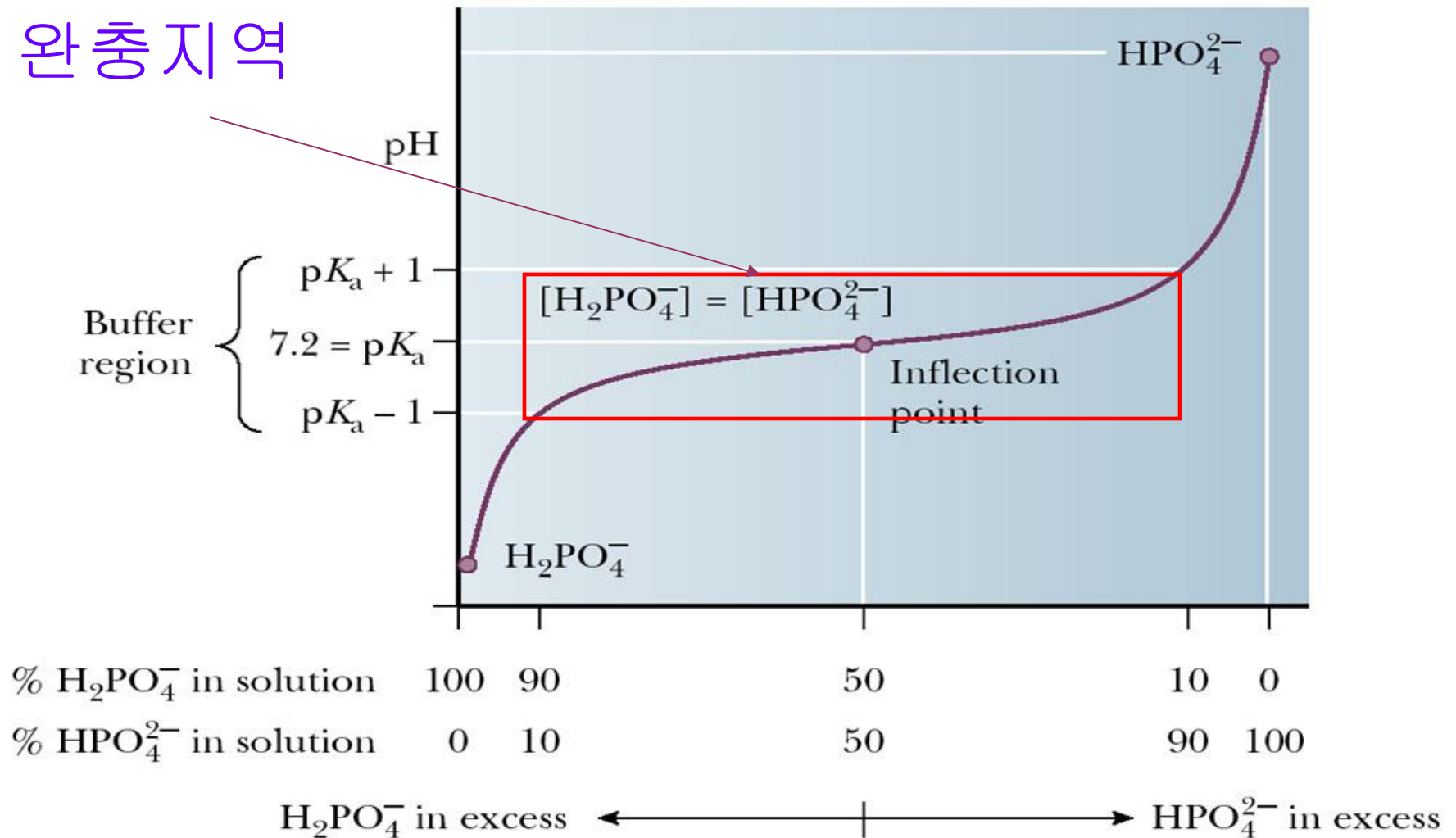


초산완충용액의 완충작용 (공통이온효과)



인산완충용액의 완충작용

완충지역



완충지역

- 완충용액이 pH 변화에 저항하는 성질을 보이는 pH
- pH가 pKa와 같을 때 완충능력이 가장 강력하다.
- 완충지역은 $\text{pKa} - 1 < \text{pH} < \text{pKa} + 1$

생리적 완충용액

- ① 인산 완충용액 (세포내액)
- ② 탄산-중탄산 완충용액 (혈액)

생리적 완충용액의 중요성

생리적 pH 유지 = 세포 내 pH 유지

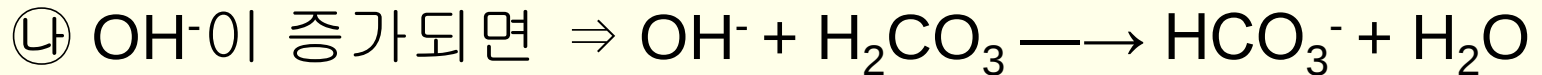
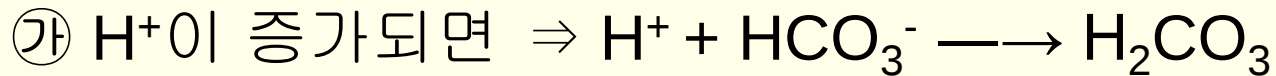
탄산-중탄산 완충용액 (혈액)

① H_2CO_3 와 그 짝염기인 HCO_3^- 의 완충용액을 이루기 때문.



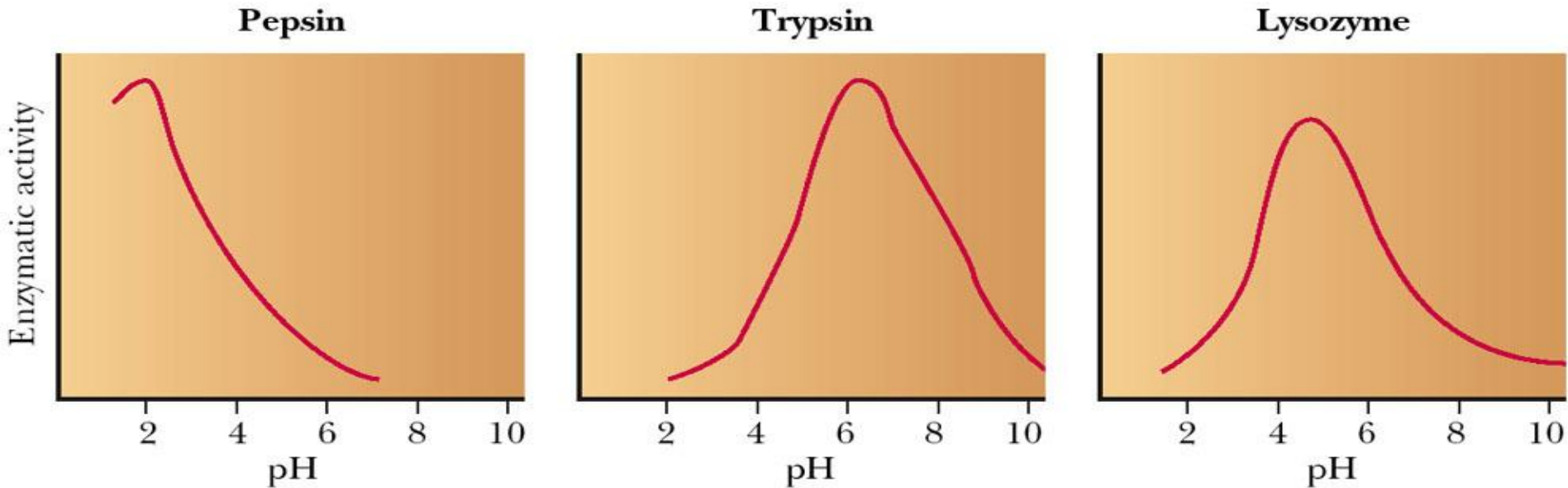
② 탄산과 중탄산이온의 짝산—짝염기 쌍은

H^+ 및 OH^- 을 흡수함으로 써 pH의 급격한 변화를 막아 줌.



생체에서 완충용액이 중요한 이유는?

- 효소의 최적 pH 유지



Lactic acid-Not always the bad guy

- 근육피로와 통증의 원인물질
- 포도당으로 전환
- 근육의 수축이완이 계속될 수 있게 도와줌



Why is **water necessary** for life?

- The unique fitness of water for forming **hydrogen bonds** determines the properties of many important biomolecules.
- Water can also act as **an acid and a base**, giving it great versatility in biochemical reaction.



원자들의 전기음성도가 차이나지
않는다면 생명체에는 어떤 일이 생길지
상상해보자.

How to make buffer?

1. 만들고자 하는 완충용액의 pH값에 가까운 pKa값을 갖는 산을 선택한다.
2. 완충지역: $pK_a \pm 1$ 의 pH
3. 용액제조에 사용할 산과 염기의 비율을 결정한다.

(Henderson-Hasselbach Equation 사용)

pH 7.0인 완충용액의 제조

1. pKa 값이 pH 7.0과 비슷한 약산을 선택한다. → pKa 값이 7.2인 인산이 적절하다.



1. 공역산과 공역염기의 비율을 결정한다.

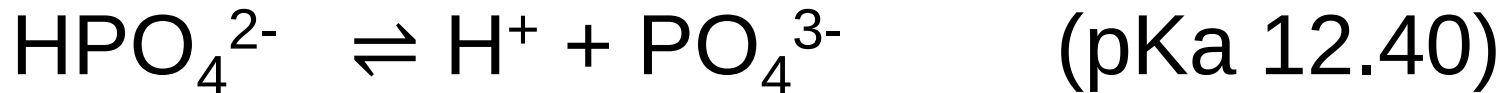
$$\text{pH} = \text{pKa} + \log [\text{공역염기}]/[\text{공역산}]$$

$$7.0 = 7.2 + \log [\text{공역염기}]/[\text{공역산}]$$

$$[\text{공역염기}]/[\text{공역산}] = 0.63$$

Oxalic acid (1)	HOOC—COOH	HOOC—COO ⁻	5.9×10^{-2}	1.23
Oxalic acid (2)	HOOC—COO ⁻	⁻ OOC—COO ⁻	6.4×10^{-5}	4.19
Malonic acid (1)	HOOC—CH ₂ —COOH	HOOC—CH ₂ —COO ⁻	1.49×10^{-3}	2.83
Malonic acid (2)	HOOC—CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —COO ⁻	2.03×10^{-6}	5.69
Malic acid (1)	HOOC—CH ₂ —CHOH—COOH	HOOC—CH ₂ —CHOH—COO ⁻	3.98×10^{-4}	3.40
Malic acid (2)	HOOC—CH ₂ —CHOH—COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —CHOH—COO ⁻	5.5×10^{-6}	5.26
Succinic acid (1)	HOOC—CH ₂ —CH ₂ —COOH	HOOC—CH ₂ —CH ₂ —COO ⁻	6.17×10^{-5}	4.21
Succinic acid (2)	HOOC—CH ₂ —CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —CH ₂ —COO ⁻	2.3×10^{-6}	5.63
Carbonic acid (1)	H ₂ CO ₃	HCO ₃ ⁻	4.3×10^{-7}	6.37
Carbonic acid (2)	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ²⁻	5.6×10^{-11}	10.20
Citric acid (1)	HOOC—CH ₂ —C(OH) (COOH)—CH ₂ —COOH	HOOC—CH ₂ —C(OH) (COOH)—CH ₂ —COO ⁻	8.14×10^{-4}	3.09
Citric acid (2)	HOOC—CH ₂ —C(OH) (COOH)—CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —C(OH)(COOH) —CH ₂ —COO ⁻	1.78×10^{-5}	4.75
Citric acid (3)	⁻ OOC—CH ₂ —C(OH)(COOH) —CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —C(OH) (COO ⁻)—CH ₂ —COO ⁻	3.9×10^{-6}	5.41
Phosphoric acid (1)	H ₃ PO ₄	H ₂ PO ₄ ⁻	7.25×10^{-3}	2.14
Phosphoric acid (2)	H ₂ PO ₄ ⁻	HPO ₄ ²⁻	6.31×10^{-8}	7.20
Phosphoric acid (3)	HPO ₄ ²⁻	PO ₄ ³⁻	3.98×10^{-13}	12.40

인산 (다양성자 산)의 pKa



pH 7.0인 완충용액의 제조

1. pKa 값이 pH 7.0과 비슷한 약산을 선택한다. → pKa 값이 7.2인 인산이 적절하다.



1. 공역산과 공역염기의 비율을 결정한다.

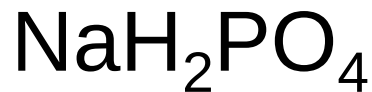
$$\text{pH} = \text{pKa} + \log [\text{공역염기}]/[\text{공역산}]$$

$$7.0 = 7.2 + \log [\text{공역염기}]/[\text{공역산}]$$

$$[\text{공역염기}]/[\text{공역산}] = 0.63$$

pH 7.0인 완충용액의 제조

HPO_4^{2-} (염기): H_2PO_4^- (산) : 0.63:1 비율로
혼합한다.



완충작용과 pH의 변화에 관한 실험

- 증류수 100ml (pH 7.0) 에 0.1M HCl 1ml을 가했을 때의 pH는?
- 완충용액 100ml (pH 7.0) 에 0.1M HCl 1ml을 가했을 때의 pH는?