

물: 생화학반응의 용매

2

강의 내용

1. 물의 중요성

2. 물의 구조

3. 물의 성질

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

4. pH와 pKa

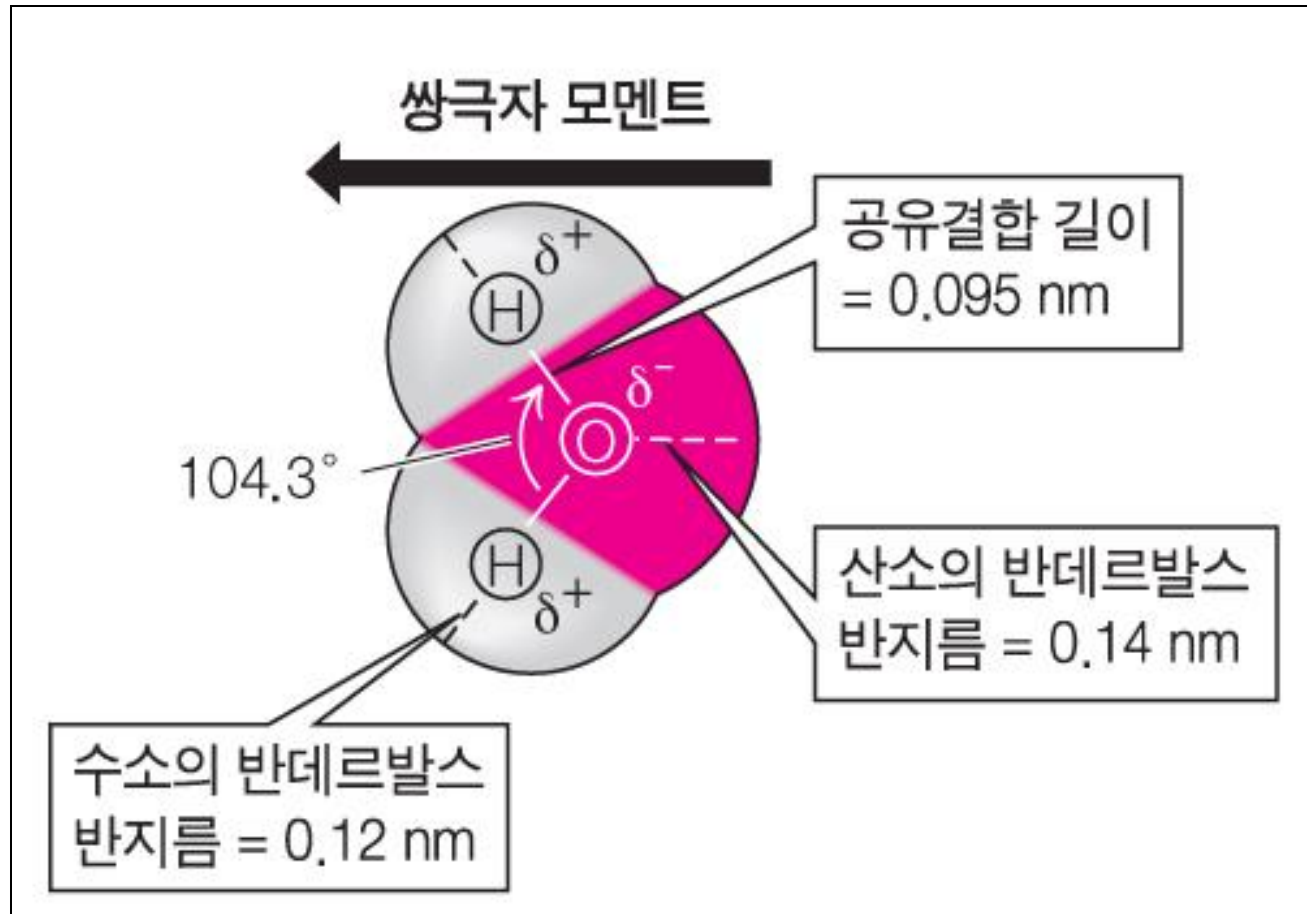
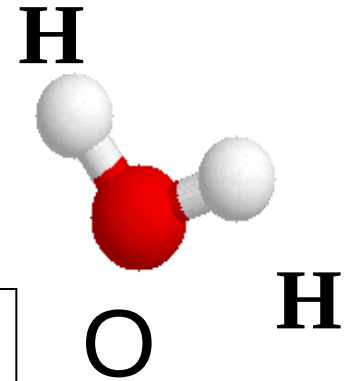
5. 완충용액

1. 물의 중요성

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



2. 물의 구조



3. 물의 성질

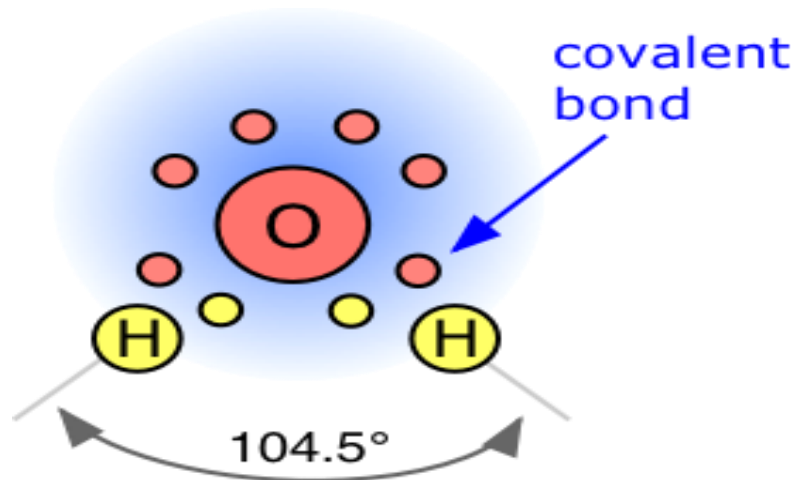
- 1) 물은 극성을 띤다.
- 2) 물은 용매로 작용한다.
- 3) 물은 수소결합을 형성한다.
- 4) 물은 체온을 조절한다.
- 5) 물은 산과 염기로 작용한다

3. 물의 성질

1) 물은 극성을 띤다.

- 극성 (polar nature)

Polar: 원자의 결합 시 전자가 균등하게
배분되지 않아서
즉, 원자간의 전기음성도 차이가 커서



전기음성도

- 원자가 전자를 자기 쪽으로 끌어당기는 경향

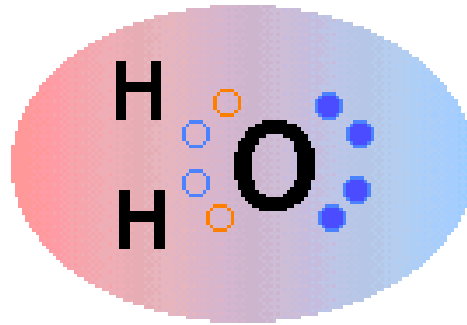
표 2.1

몇 가지 선택된 원소들의 전기음성도

원소	전기음성도*
산소	3.5
질소	3.0
황	2.6
탄소	2.5
인	2.2
수소	2.1

*전기음성도 값은 상대치이며 양의 값으로 나타낸다. 일부 금속의 경우는 1보다 작은 값이며 플루오르의 경우는 4로서, 대부분 1~4의 범위 내에 있다.

극성이란 왜 생기는 걸까?



$\delta+$

$\delta-$

쌍극자(dipole)

전기음성도가 다른 원자가 결합하면 전자가
균등하게 배분되지 않아

(전자의 분포가 비대칭적으로 분산되어)

부분적인 음전하와 양전하를 띠게 된다.

→ 극성 (polar) 발생

Nonpolar (비극성)

- sharing of e^- in the bond is equal

예: CH_4

- 기하학적 구조가 대칭적인 경우

예: 이산화탄소 $\text{O}=\text{C}=\text{O}$ (CO_2)

Question : 다음 중 극성물질인 것은?

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

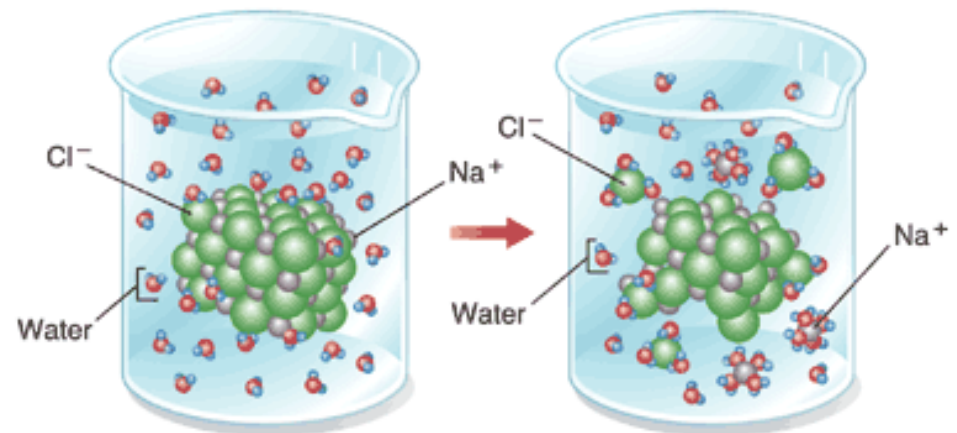
3. 물의 성질

2) 물은 용매로 작용한다.

Solvent (용매): 녹이는 물질

Solute (용질): 녹아있는 물질

Solution (용액): 용매 + 용질



소금이 물에 녹는 이유

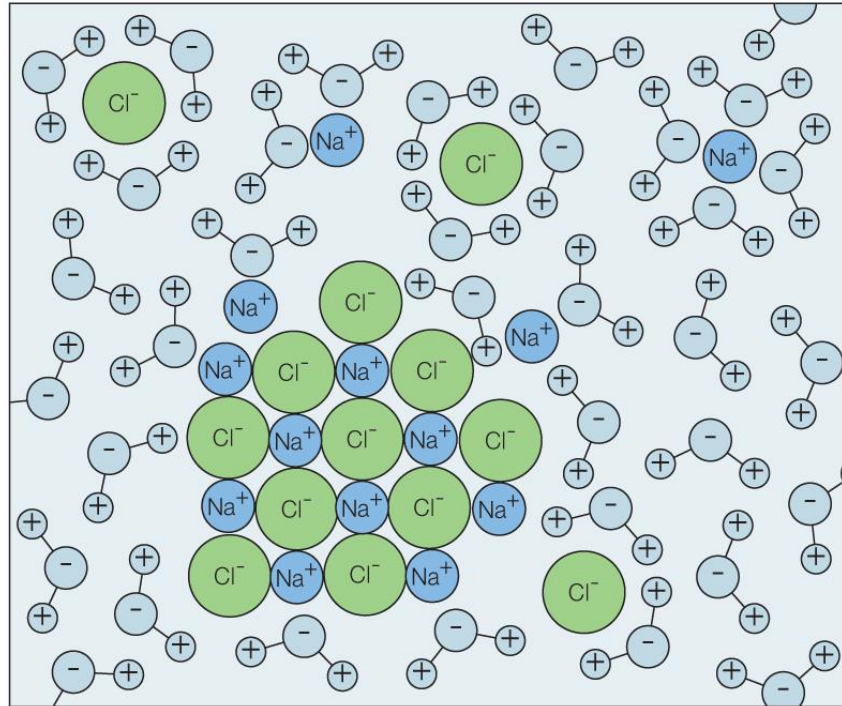


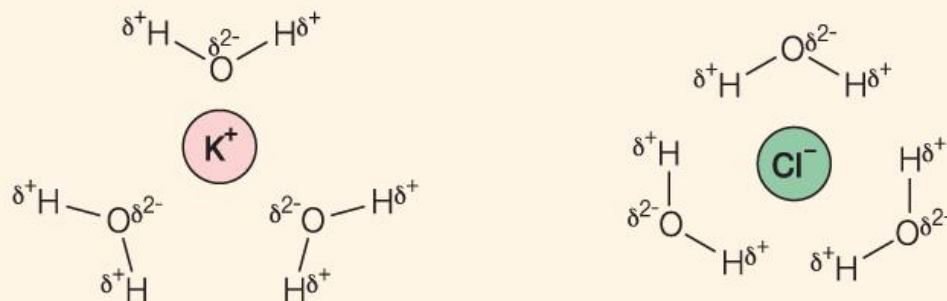
그림 2.2 이온결합이 이온-쌍극자 상호작용으로 대체된다. 이온성 고체에서는 이온결합이 양이온과 음이온을 같이 붙잡고 있다. 수용액에서는 이 이온결합들이 이온-쌍극자 상호작용으로 대체된다. 음전하를 띤 염소 이온들은 물에 있는 부분적인 양전하에 끌린다. 양전하를 띤 나트륨 이온들은 물에 있는 부분적인 음전하에 끌린다. 물을 둘러싸고 있는 이런 유형의 이온들을 수화 껍질(hydration shell)이라고 한다.

물에 녹는 물질과 녹지 않는 물질

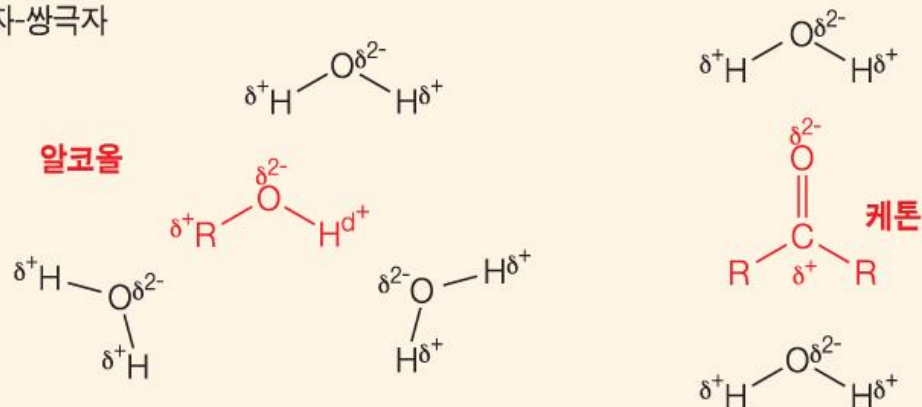
- 물은 극성을 띠므로 극성을 지닌 물질은 물에 녹는다.
- 이온화되는 화합물과 부분적 전하를 띤 물질은 물에 잘 녹는다.
 - NaCl, KCl
 - Carboxylic acid (-COOH) $\rightarrow$ COO^-
 - Ketone (C=O)

극성화합물이 물에 녹는 이유

A 이온과 물 사이의 이온-쌍극자 상호작용.



B 극성 화합물과 물 사이의 쌍극자-쌍극자 상호작용.



여기에 나타낸 예는 알코올(ROH)과 케톤(R₂C=O)이다.

그림 2.3 이온-쌍극자 상호작용과 쌍극자-쌍극자 상호작용은 이온 화합물과 극성 화합물들이 물에 녹는 데 도움이 된다.

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
 - 이온-쌍극자 결합
 - 이온상호작용(염교)
 - 반데르발스 힘
 - 소수성결합
 - 수소결합

공유결합과 비공유결합의 결합에너지 비교

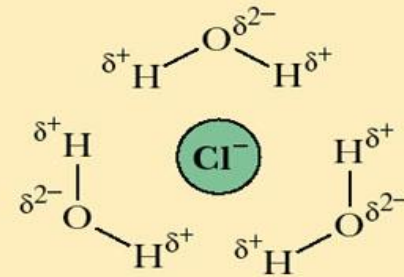
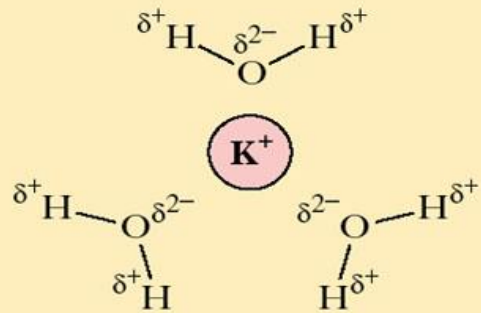
표 2.2

생화학에 나오는 결합들의 강도

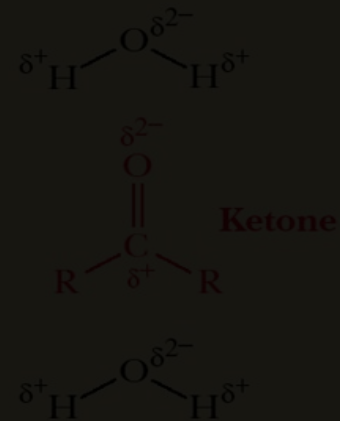
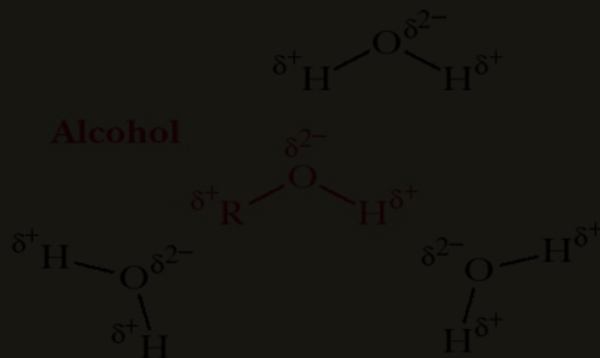
결합 유형	강도(kcal/mol)	강도(kJ/mol)
공유결합(C—H)	105	413
공유결합(O—H)	110	460
이온 상호작용	1~20	4~80
이온-쌍극자	5	20
수소결합	5	20
반데르발스 상호작용	1	4

① 이온-쌍극자 상호작용

(a)

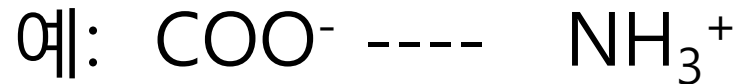


(b)



② 이온상호작용 :염교 (Salt bridge)

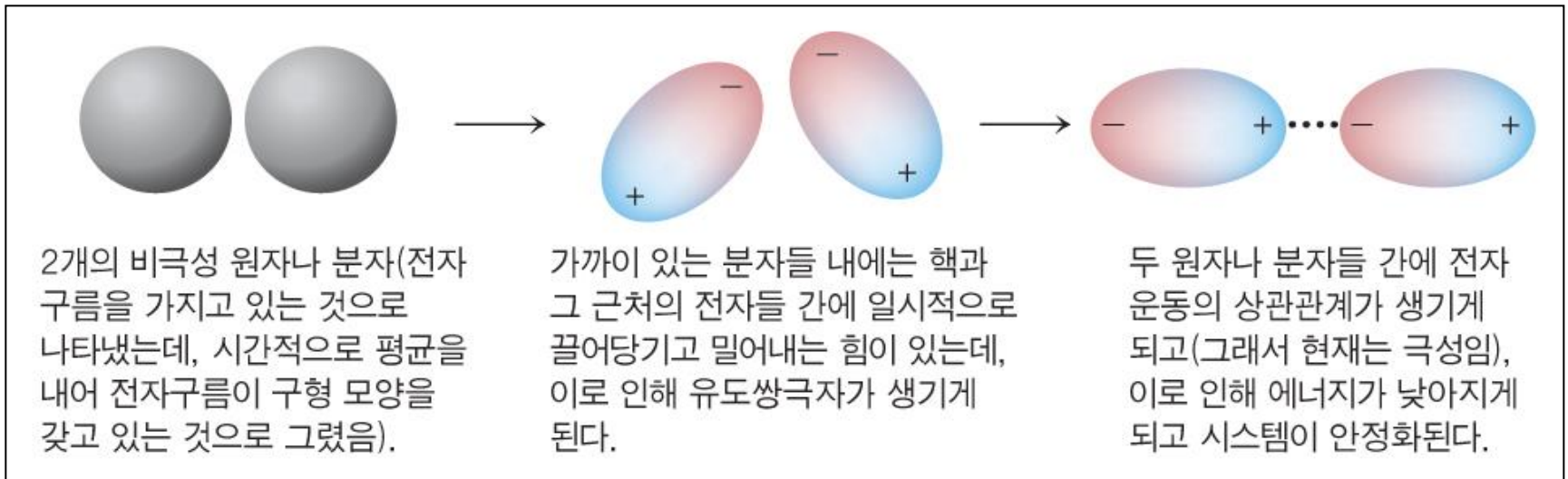
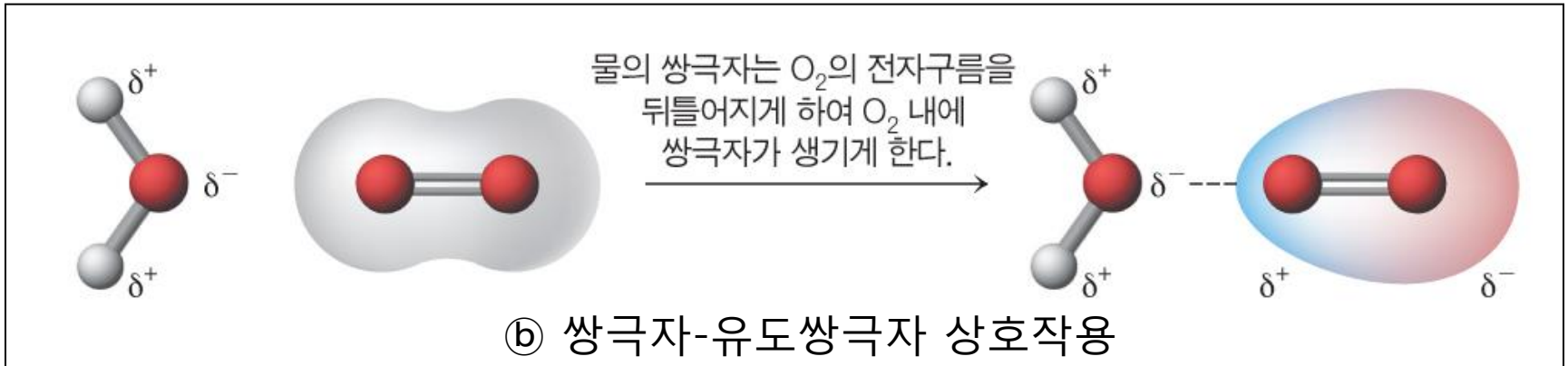
- 이온화 되어있는 작용기들 간의 결합
- 반대전하를 갖는 분자들간의 결합



③ 반데르발스 힘

일시적으로 생긴 쌍극자들간의 약한 인력

① 쌍극자-쌍극자 상호작용



③ 유도쌍극자-유도쌍극자 상호작용

용질의 분류

1. **Hydrophilic** (친수성): 물을 좋아하는 용질
물에 녹는다.
예: 알코올, 케톤, 아미노산, 인산, 염류
2. **Hydrophobic** (소수성): 물을 싫어하는 성질
벤젠이나 클로로포름과 같은 유기용매에 녹는다
예: 지방, 콜레스테롤
3. **Amphopathic** (양친매성):
친수성과 소수성을 모두 가짐

표 2.3 소수성 물질과 친수성 물질의 예

친수성

극성인 공유결합 화합물(예: $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ [에탄올]과 같은 알코올류와 $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{O}$ [아세톤]과 같은 케톤류)

당

이온 화합물(예: KCl)

아미노산, 인산 에스터

소수성

비극성인 공유결합 화합물(예: C_6H_{14} [헥세인]과 같은 탄화수소류)

지방산, 콜레스테롤

팔미트산의 나트륨염: 팔미트산염 나트륨
 $(\text{Na}^+ \text{OOC}(\text{CH}_2)_{14}\text{CH}_3)$

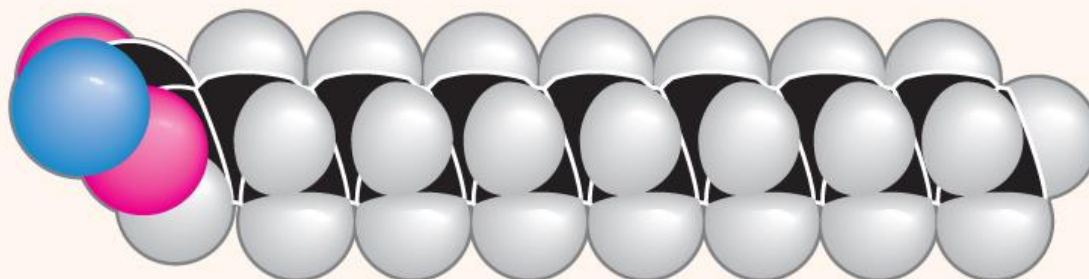
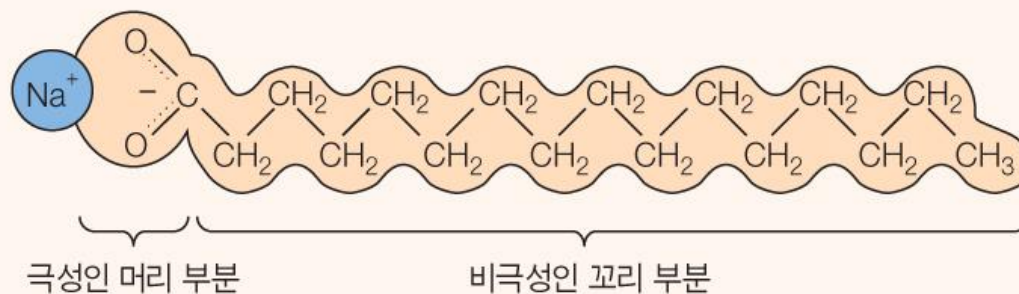


그림 2.6 양친매성 분자인 팔미트산염 나트륨. 양친매성 분자들은 종종 공과 지그재그 형의 선으로 된 구조(~~~~)로 기호화하여 나타낸다. 공은 친수성인 극성 머리 부분을 나타내고, 지그재그 선은 비극성인 소수성 탄화수소 꼬리를 나타낸다.

기름은 왜 물에 녹지 않는가?

④ 소수성 상호작용

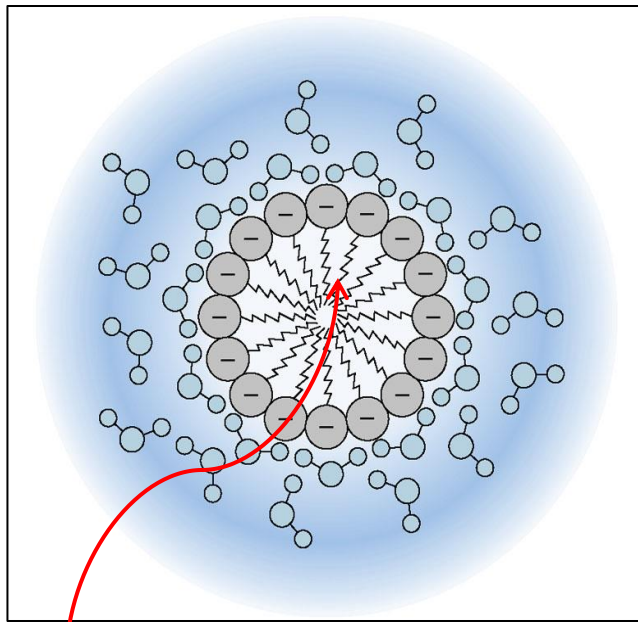
비극성물질은 물에 녹지 않는다.

그래서 기름은 물 위에 뜬다.

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



소수성결합

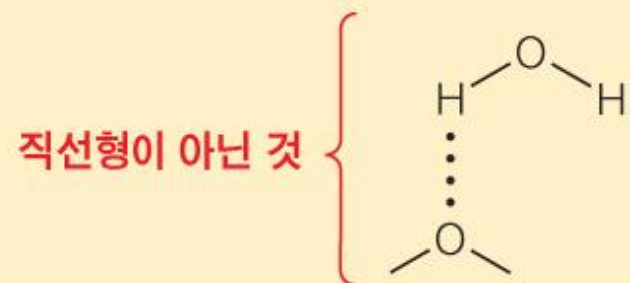
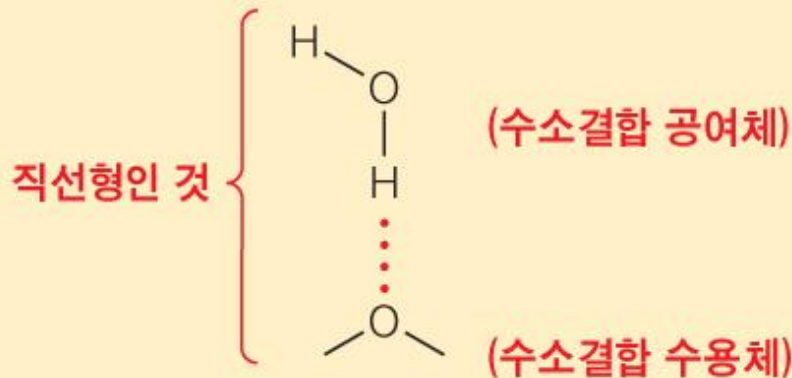
- 마요네즈
- O/W **유화**
(oil in water emulsion)
- 물 속에 기름이 분산되어
있는 형태



3. 물의 성질

3) 물 분자는 수소결합을 만든다.

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



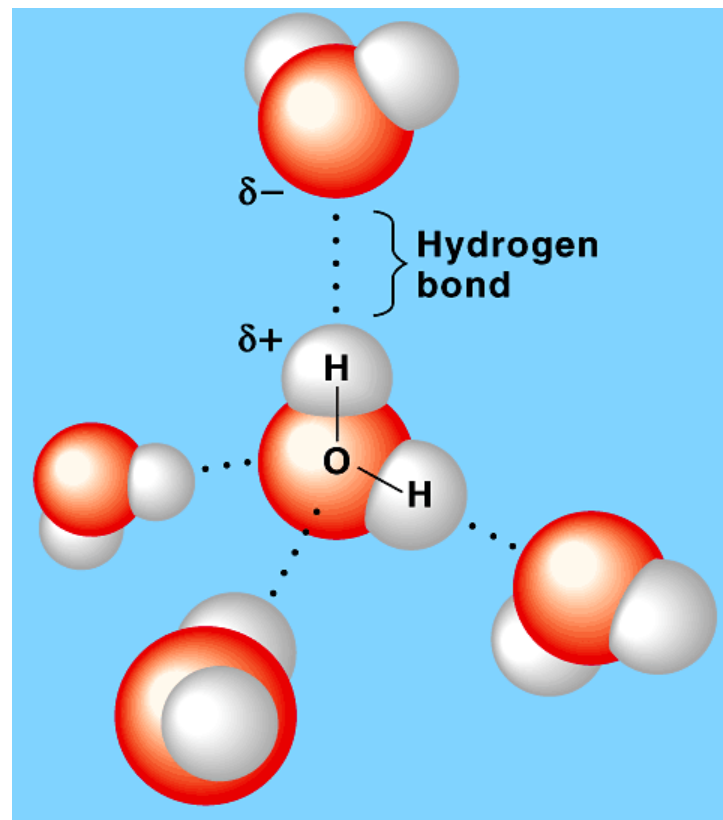
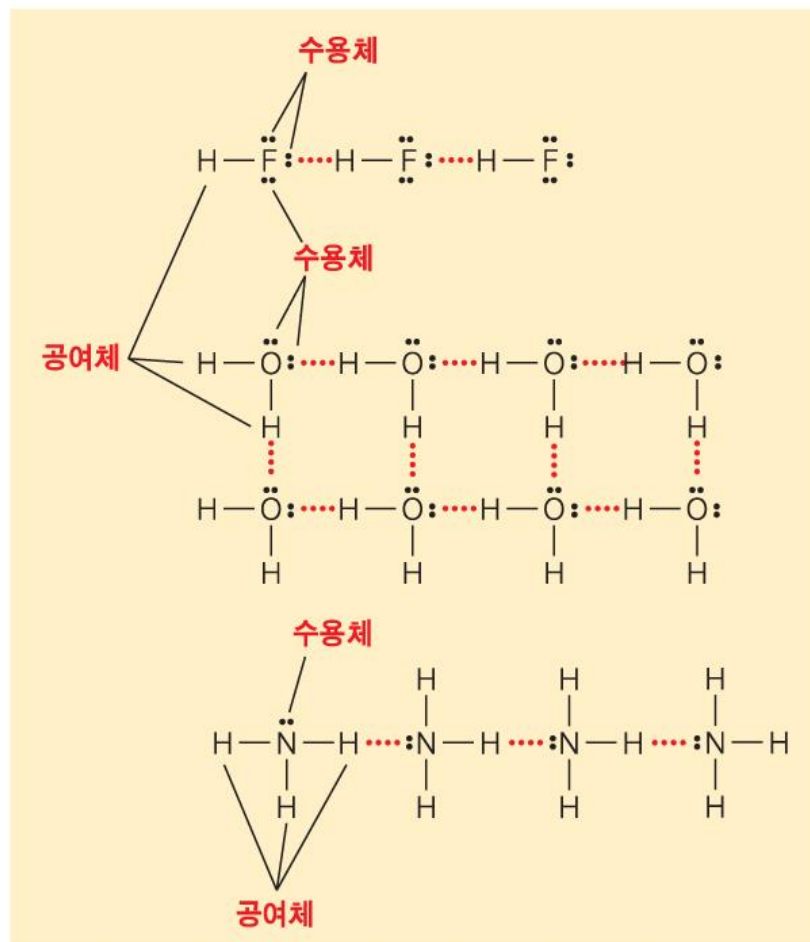


그림 2.9 수소결합 부위. HF, H₂O, NH₃ 내에 있는 수소결합 부위의 개수 비교. (실제로 기하학적 구조는 나타내지 않았다.) 각 HF 분자는 1개의 수소결합 공여체와 3개의 수소결합 수용체를 가지고 있다. 각각의 H₂O 분자는 2개의 공여체와 2개의 수용체를 가지고 있다. 각 NH₃ 분자는 3개의 공여체와 1개의 수용체를 가지고 있다.

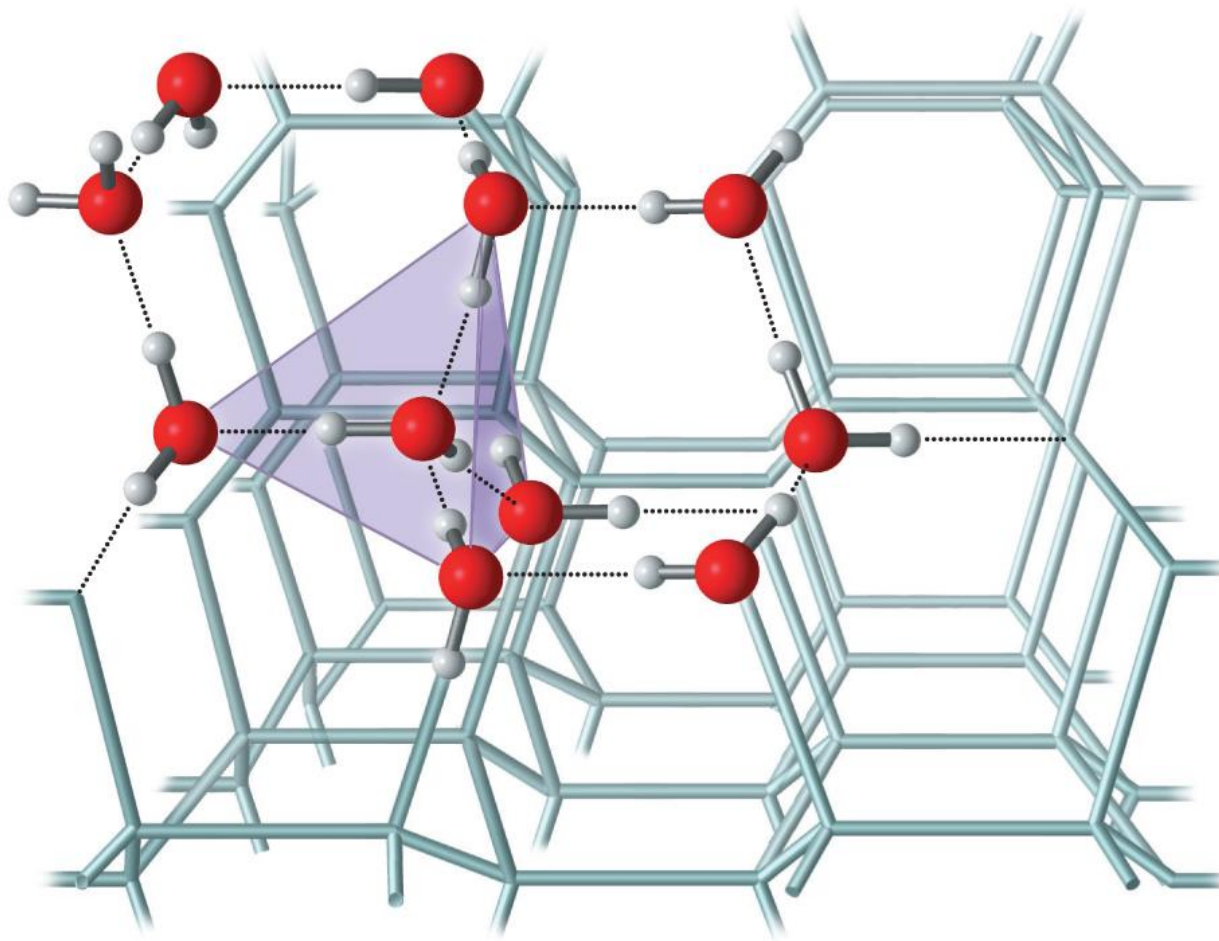
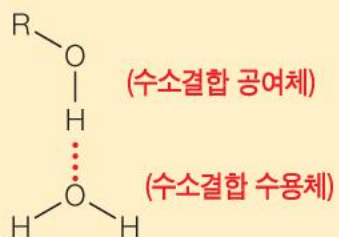


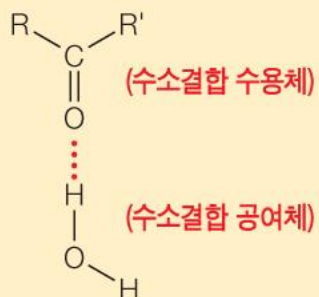
그림 2.10 H_2O 의 4면체형 수소결합. 얼음 결정에서 H_2O 분자의 배열을 보면 각각의 H_2O 분자는 다른 분자 4개와 수소결합을 형성하고 있다.

그림 2.11 극성 작용기와 물 사이의 수소결합.

알코올의 수산기와 H₂O 사이



케톤의 카보닐기와 H₂O 사이



아민의 아미노기와 H₂O 사이



표 2.5

생물학적으로 중요한 분자들 내에서 발견되는 주요 수소결합의 유형

결합 배열

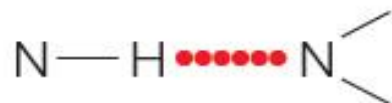
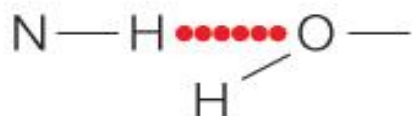
결합이 발생하는 분자



H 결합이 H_2O 안에 형성됨



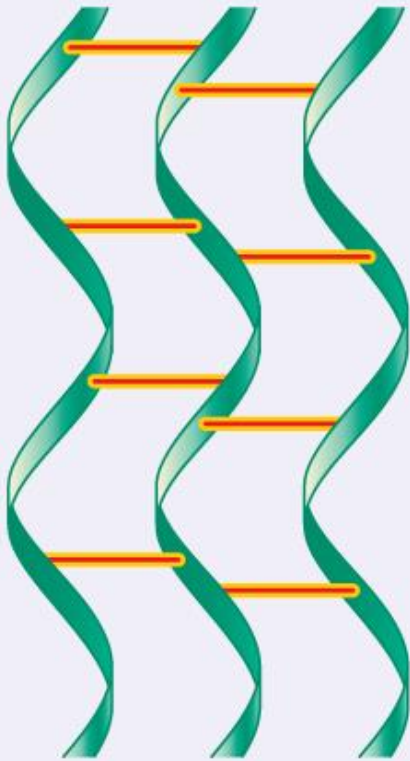
물이 다른 분자와 결합됨



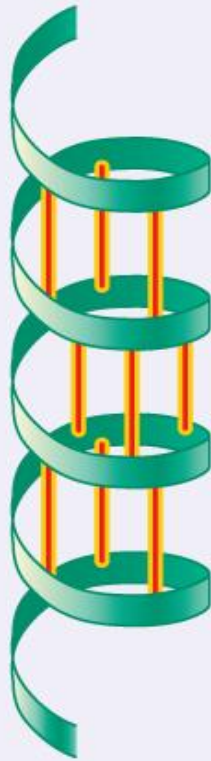
단백질과 핵산의 구조에 중요함

생물학적으로 중요한 수소결합의 예

단백질 내의 수소결합의 유형



가닥 간의 수소결합



가닥 내의 수소결합

— = 수소결합

DNA 이중나선의 가닥들 사이의 수소결합



가닥 간의 수소결합

물의 끓는점이 높은 이유는 물 분자 간의 수많은 수소결합 때문이다

표 2.4 물, 암모니아, 메테인의 특성 비교

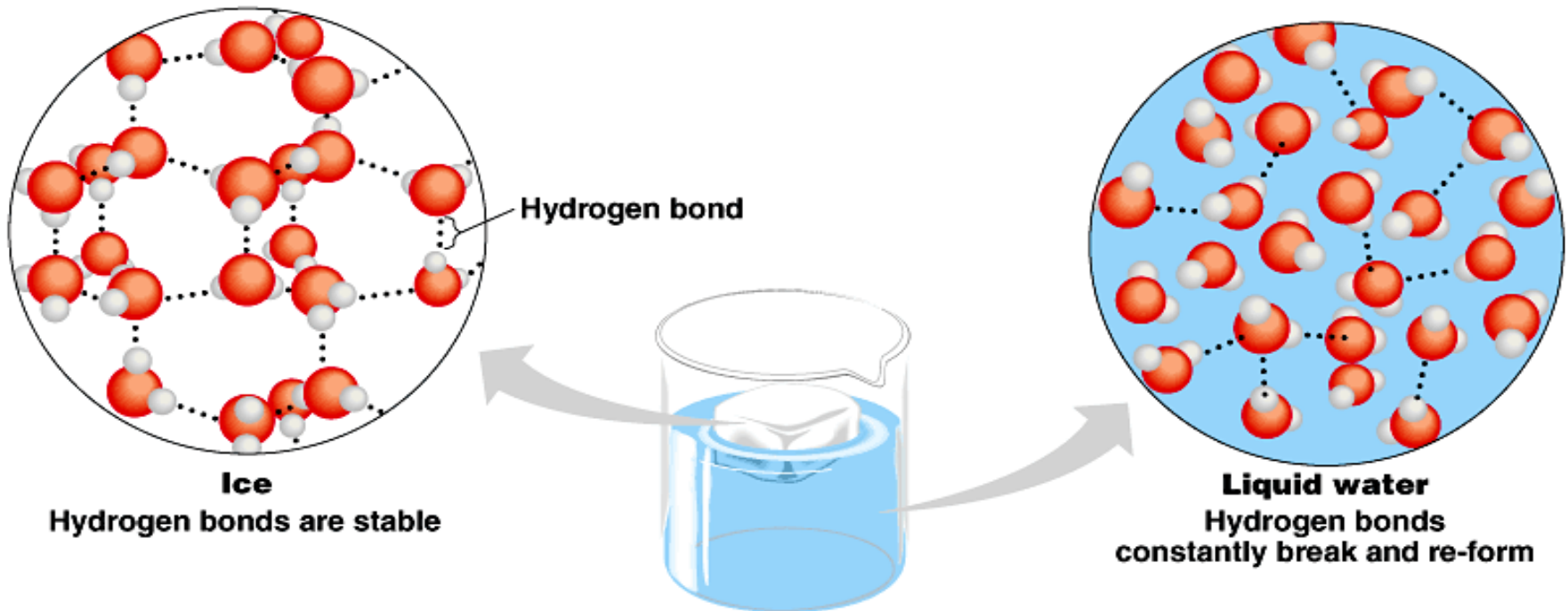
물질	분자량	녹는점(°C)	끓는점(°C)
물(H ₂ O)	18.02	0.0	100.0
암모니아(NH ₃)	17.03	-77.7	-33.4
메테인(CH ₄)	16.04	-182.5	-161.5

물의 밀도는 변화한다

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

→ 얼음이 물위에 뜨는 이유

→ 맥주병을 냉동실에 두면 터지는 이유



3. 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 L의 물을 배설하여 열을 손실한다.

요약

- 생화학에서 중요한 비공유결합은 이온-쌍극자, 염교, 반데르발스, 소수성, 수소결합이다.
- 수소결합은 쌍극자-쌍극자 결합이다
- 물분자는 광범위하게 수소결합되어 있다.
- 단백질과 핵산의 3차원 구조는 수소결합에 의해 안정화된다.

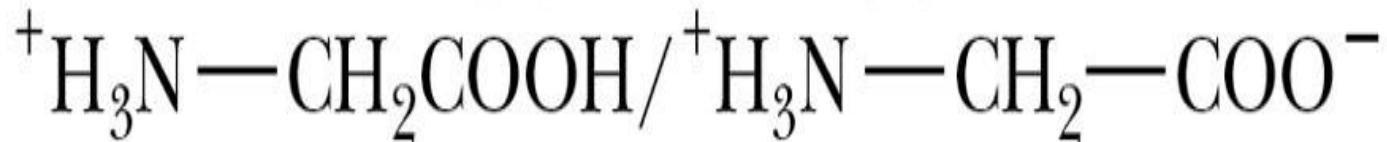
3. 물의 성질

5) 물은 산과 염기로 작용한다.

What Are Acids (산) and Bases(염기) ?

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

(문제) 산과 염기를 구별해 보세요

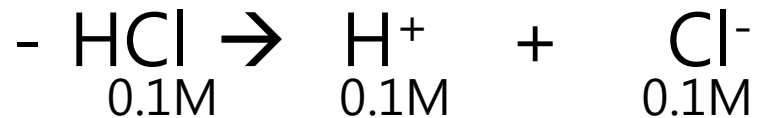


전해 질: 물에 녹아 이온으로 쪼개져 전류가 흐르는 물질

- 강전해질

- 염산, 황산, 수산화나트륨 등

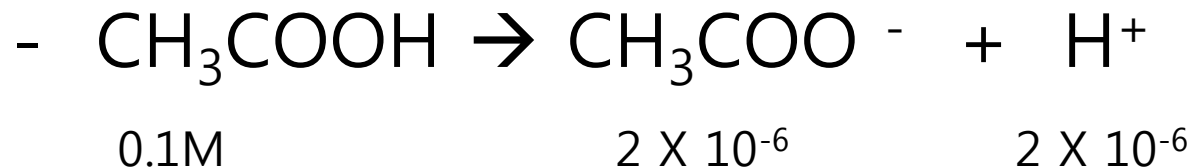
- 100% 전리



- 약전해질

- 초산, 인산, 탄산 등

- 10% 미만 전리



4. pH와 pKa

1) pH는 용액 중 수소이온 농도의 마이너스 대수
$$\text{pH} = -\log_{10} [\text{H}^+]$$

2) pKa는 Ka 즉, 산 해리상수의 마이너스 대수
$$\text{pKa} = -\log_{10} K_a$$

1) pH

용액 중 수소이온 농도의 마이너스 대수

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

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

그러므로 $\text{pH} = -\log_{10} 10^{-3} = 3$ 이다.

예) $10^{-4} \text{ M NaOH} \rightarrow [\text{OH}^-]$ 가 10^{-4} M 생성

그러므로 $\text{pOH} = -\log_{10} 10^{-4} = 4$

$\text{pH} + \text{pOH} = 14$ 이므로

10^{-4} M NaOH 의 pH는 10 이다.

K_w (물의 이온적)

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

pH는 왜 중요한가?

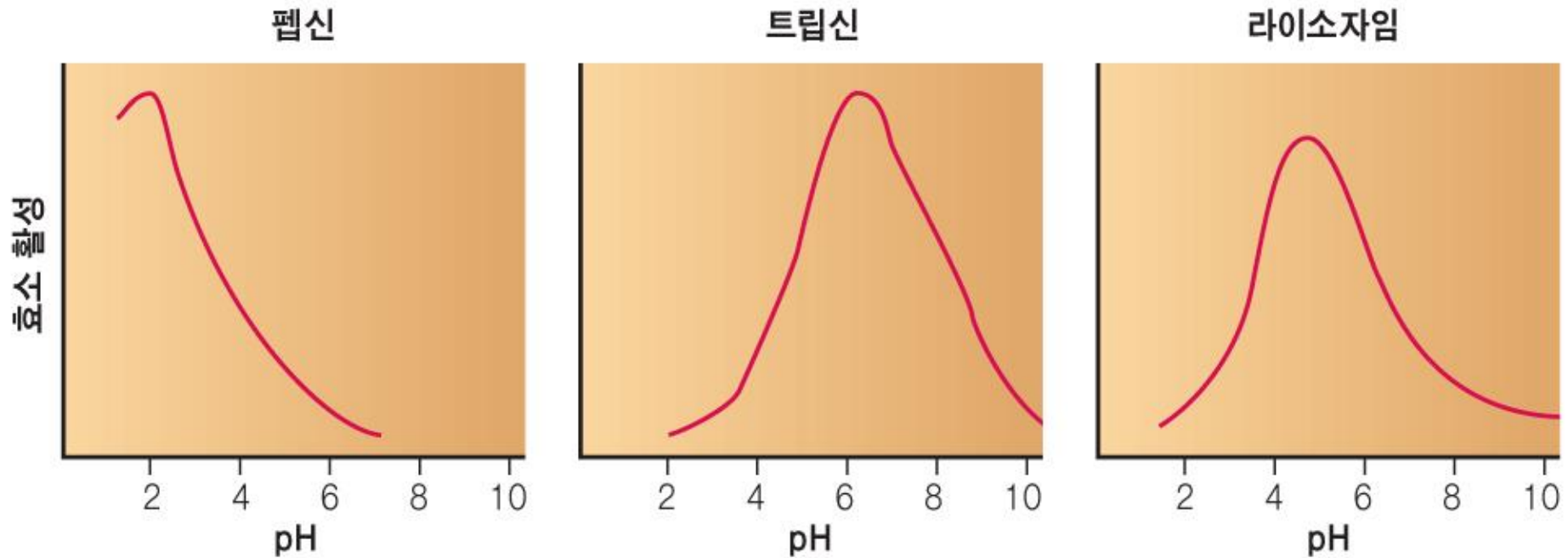


그림 2.14 pH 대 효소 활성. 펩신, 트립신, 라이소자임은 모두 pH 최적 곡선이 가파른 형태이다. 펩신은 위장에서 발견되는 소화효소에 대해 예상했듯이, 매우 산성인 조건하에서 최대 활성이 있다. 트립신은 pH 6 근방에서 가장 활성이 크며, 라이소자임은 pH 5 근방에서 최대 활성을 보인다.

Acid dissociation constant, K_a (산 해리상수)

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

K_a : 산의 강도를 나타내는 수치

예: K_a 가 10^{-1} , 10^{-2} 인 산이 있다.

이 중 산의 강도가 높은 것은 ?

Ka와 pKa의 관계

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

예: K_a 가 10^{-1} 인 산은 1/10 전리

K_a 가 10^{-2} 인 산은 1/100 전리

- 그러므로 K_a 가 10^{-1} 인 산이 10^{-2} 보다 전리하려는 성질이 강하다.
- 전리하려는 성질이 강할수록 강한 산이다.
- 즉, K_a 가 10^{-1} 인 산이 K_a 가 10^{-2} 인 산보다 강산이다.

Ka와 pKa의 관계 : $-\log_{10} K_a = pK_a$

K_a 가 10^{-1} 인 산은 pKa 값이 1이 되고

K_a 가 10^{-2} 인 산은 pKa 값이 2가 된다.

K_a 가 10^{-1} 인 산이 K_a 가 10^{-2} 인 산보다 강산이므로
pKa 값이 작을수록 강한 산이 된다.

약산의 pKa

표 2.6 몇 가지 산의 해리상수

산	HA	A ⁻	K _a	pK _a
피루브산	CH ₃ COCOOH	CH ₃ COCOO ⁻	3.16×10^{-3}	2.50
포름산	HCOOH	HCOO ⁻	1.78×10^{-4}	3.75
젖산	CH ₃ CHOHCOOH	CH ₃ CHOHCOO ⁻	1.38×10^{-4}	3.86
벤조산	C ₆ H ₅ COOH	C ₆ H ₅ COO ⁻	6.46×10^{-5}	4.19
아세트산	CH ₃ COOH	CH ₃ COO ⁻	1.76×10^{-5}	4.76
암모늄이온	NH ₄ ⁺	NH ₃	5.6×10^{-10}	9.25
옥살산 (1)	HOOC—COOH	HOOC—COO ⁻	5.9×10^{-2}	1.23
옥살산 (2)	HOOC—COO ⁻	⁻ OOC—COO ⁻	6.4×10^{-5}	4.19
말론산 (1)	HOOC—CH ₂ —COOH	HOOC—CH ₂ —COO ⁻	1.49×10^{-3}	2.83
말론산 (2)	HOOC—CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —COO ⁻	2.03×10^{-6}	5.69
말산 (1)	HOOC—CH ₂ —CHOH—COOH	HOOC—CH ₂ —CHOH—COO ⁻	3.98×10^{-4}	3.40
말산 (2)	HOOC—CH ₂ —CHOH—COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —CHOH—COO ⁻	5.5×10^{-6}	5.26
석신산 (1)	HOOC—CH ₂ —CH ₂ —COOH	HOOC—CH ₂ —CH ₂ —COO ⁻	6.17×10^{-5}	4.21
석신산 (2)	HOOC—CH ₂ —CH ₂ —COO ⁻	⁻ OOC—CH ₂ —CH ₂ —COO ⁻	2.3×10^{-6}	5.63
탄산 (1)	H ₂ CO ₃	HCO ₃ ⁻	4.3×10^{-7}	6.37
탄산 (2)	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ²⁻	5.6×10^{-11}	10.20
시트르산 (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
시트르산 (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
시트르산 (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
인산 (1)	H ₃ PO ₄	H ₂ PO ₄ ⁻	7.25×10^{-3}	2.14
인산 (2)	H ₂ PO ₄ ⁻	HPO ₄ ²⁻	6.31×10^{-8}	7.20
인산 (3)	HPO ₄ ²⁻	PO ₄ ³⁻	3.98×10^{-13}	12.40

Henderson-Hasselbach equation

- 약산의 해리상수와 pH를 연관 짓는 방정식

$$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]} \quad \text{양쪽에 log를 취하면}$$

$$\begin{aligned} \log K_a &= \log [H^+] + \log [A^-]/[HA] \\ -\log [H^+] &= -\log K_a + \log [A^-]/[HA] \end{aligned}$$

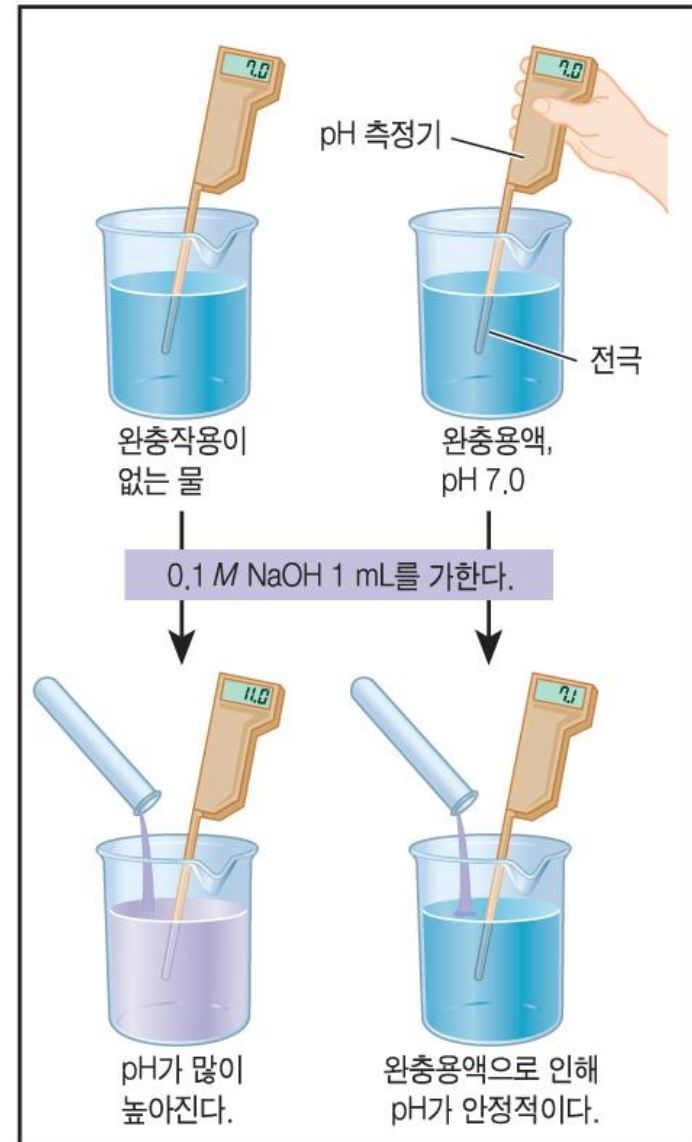
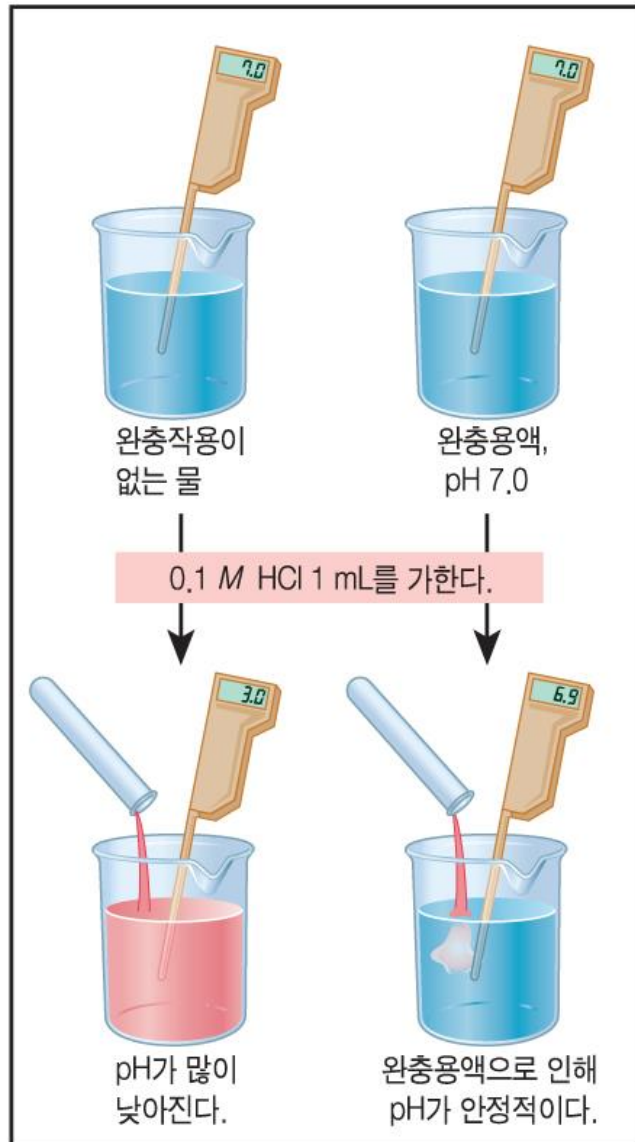
$$pH = pK_a + \log [A^-]/[HA]$$

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

질문: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 즉, 이온화된 형태로 주로 존재한다.

완충작용과 pH의 변화에 관한 실험



완충작용과 pH의 변화에 관한 실험

- 증류수 99ml (pH 7.0) 에 0.1M HCl 1ml을 가했을 때의 pH의 변화량은 ?
→ pH 3.0
- pH 7.0인 인산염 완충용액 99ml (pH 7.0) 에 0.1M HCl 1ml을 가했을 때의 pH 변화량은 ?
→ pH 6.9

증류수 99ml (pH 7.0) 에 0.1M HCl 1ml을 가했을
때의 pH의 변화량은 ?

0.1M HCl 1ml에 전리 된 H^+ 의 수

$$0.1 \text{ M} \times 1\text{ml}/1,000\text{ml} = 10^{-4} \text{ mol } H^+$$

이것을 최종부피 100ml 내의 농도로 환산하면

$$10^{-4} \text{ mol } H^+ / 0.1 \text{ L} = 10^{-3} \text{ mol/L} = 10^{-3} \text{ M}$$

$$\text{pH} = -\log 10^{-3} = 3.0$$

5. 완충용액 (buffer)

- 적은 양의 산이나 염기의 첨가 시 pH가 크게 변하지 않는 용액
- 약산과 그 공역염기로 구성됨

생리적 완충용액

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

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.

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

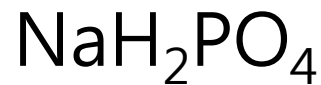
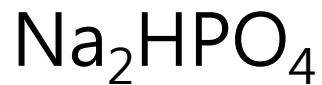
$$7.0 = 7.2 + \log [\text{공역염기}]/[\text{공역산}]$$

$$[\text{공역염기}]/[\text{공역산}] = 0.63$$

공역염기: 공역산 = 0.63 : 1의 비율로 혼합

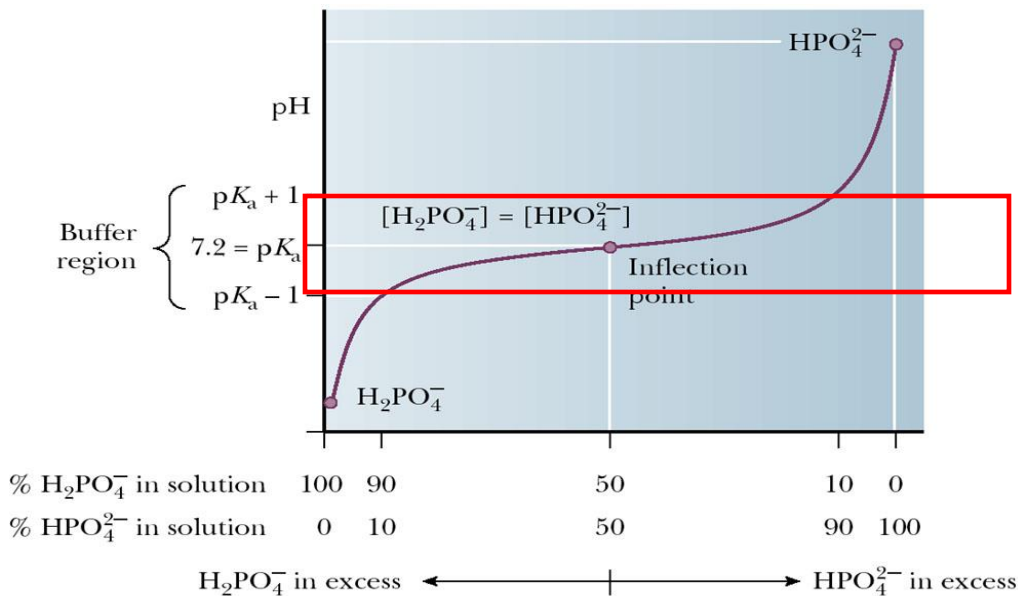
pH 7.0인 완충용액의 제조

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



완충지역

- 완충용액이 pH 변화에 저항하는 성질을 보이는 pH
- pH가 pKa와 같을 때 완충능력이 가장 강력하다.
- 완충지역은 $pK_a - 1 < pH < pK_a + 1$



탄산-중탄산 완충용액 (혈액)

① H_2CO_3 와 그 짝염기인 HCO_3^- 의 완충용액을 이루기 때문
$$\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{CO}_3 \rightarrow \text{H}^+ + \text{HCO}_3^-$$

② 탄산과 중탄산이온의 짝산—짝염기 쌍은
 H^+ 및 OH^- 을 흡수함으로 써 pH의 급격한 변화를 막아 줌

㉠ H^+ 이 증가되면 $\Rightarrow \text{H}^+ + \text{HCO}_3^- \longrightarrow \text{H}_2\text{CO}_3$

㉡ OH^- 이 증가되면 $\Rightarrow \text{OH}^- + \text{H}_2\text{CO}_3 \longrightarrow \text{HCO}_3^- + \text{H}_2\text{O}$

Lactic acid-Not always the bad guy

- 근육피로와 통증의 원인물질 (pH의 산성화)
- 젖산은 포도당으로 전환됨
- 근육의 수축이완이 계속될 수 있게 에너지 공급함

