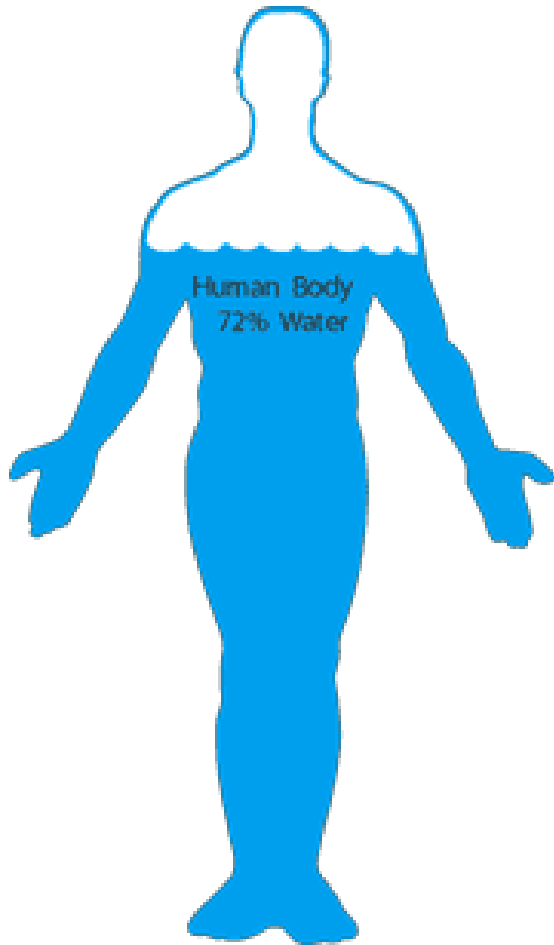


# L'acqua



- Il nostro pianeta è ricoperto per il 75 % di acqua
- La vita si è evoluta in acqua
- Le cellule sono costituite per il 70-95 % di acqua
- In natura l'acqua esiste in forma gassosa, liquida e solida

# Quantità di acqua che è contenuta nei tessuti



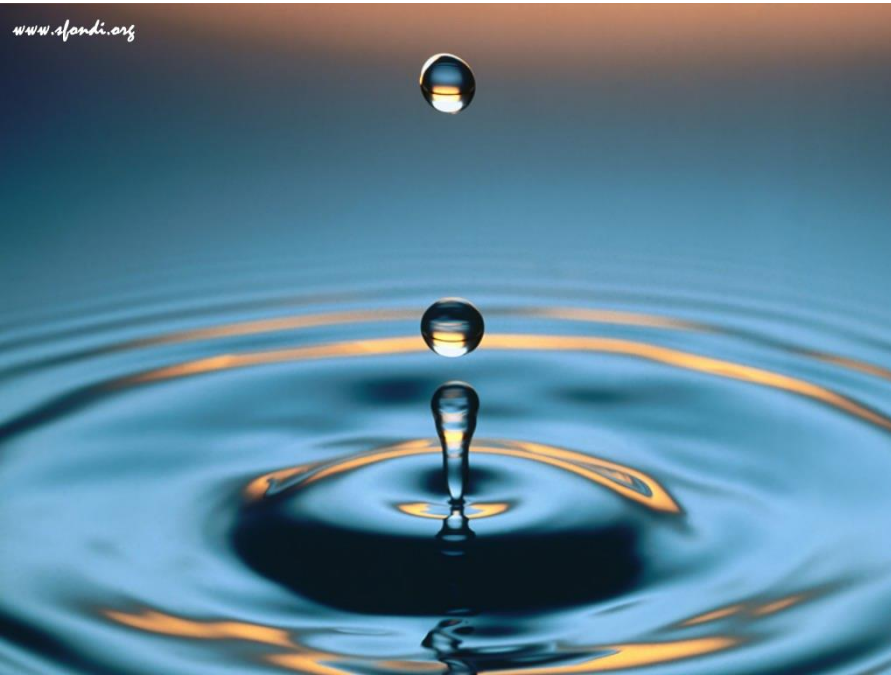
- Sangue 79.1 %
- Muscoli 75.7 %
- Fegato 69.3 %
- Tessuto adiposo 29.9 %
- Rene 82.7 %

Adulto 60 %

Neonato 66 %

Embrione di 3 mesi 95 %

# Alcune proprietà

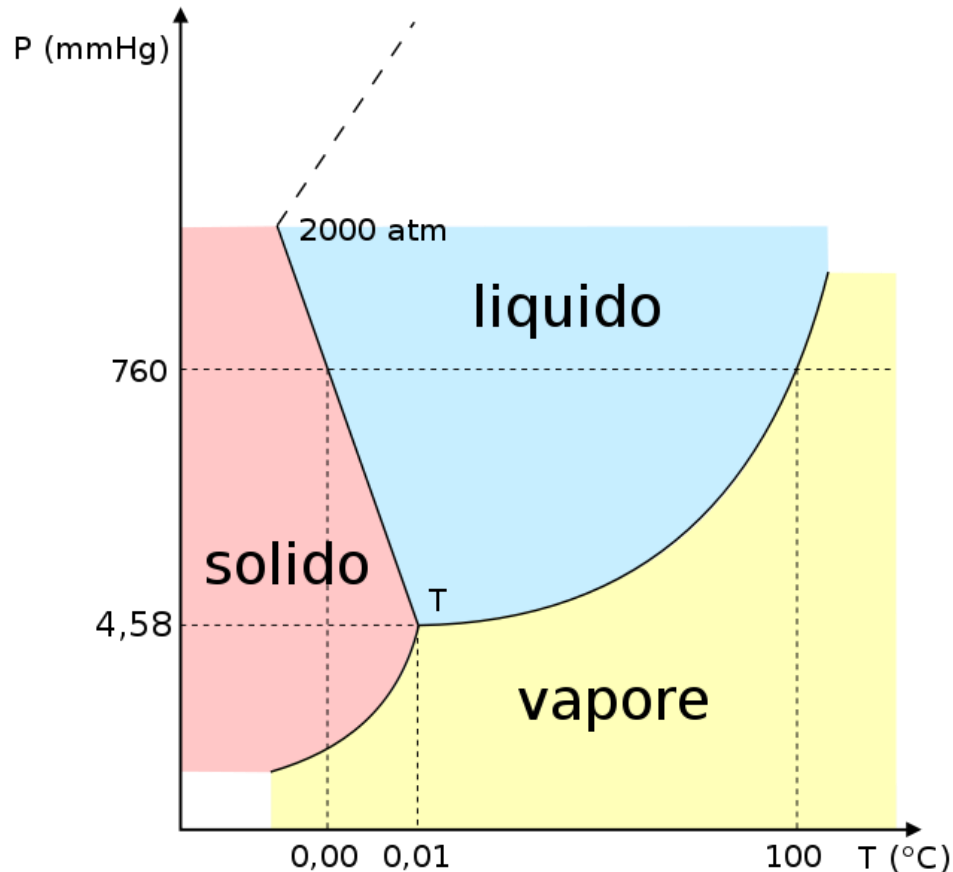


- Basso peso molecolare
- Aumento della densità durante la fusione
- Densità massima in fase liquida a 4°C
- Elevati punti di fusione e di ebollizione
- Elevata capacità termica
- Elevata tensione superficiale

# Confronto con molecole di simile peso molecolare

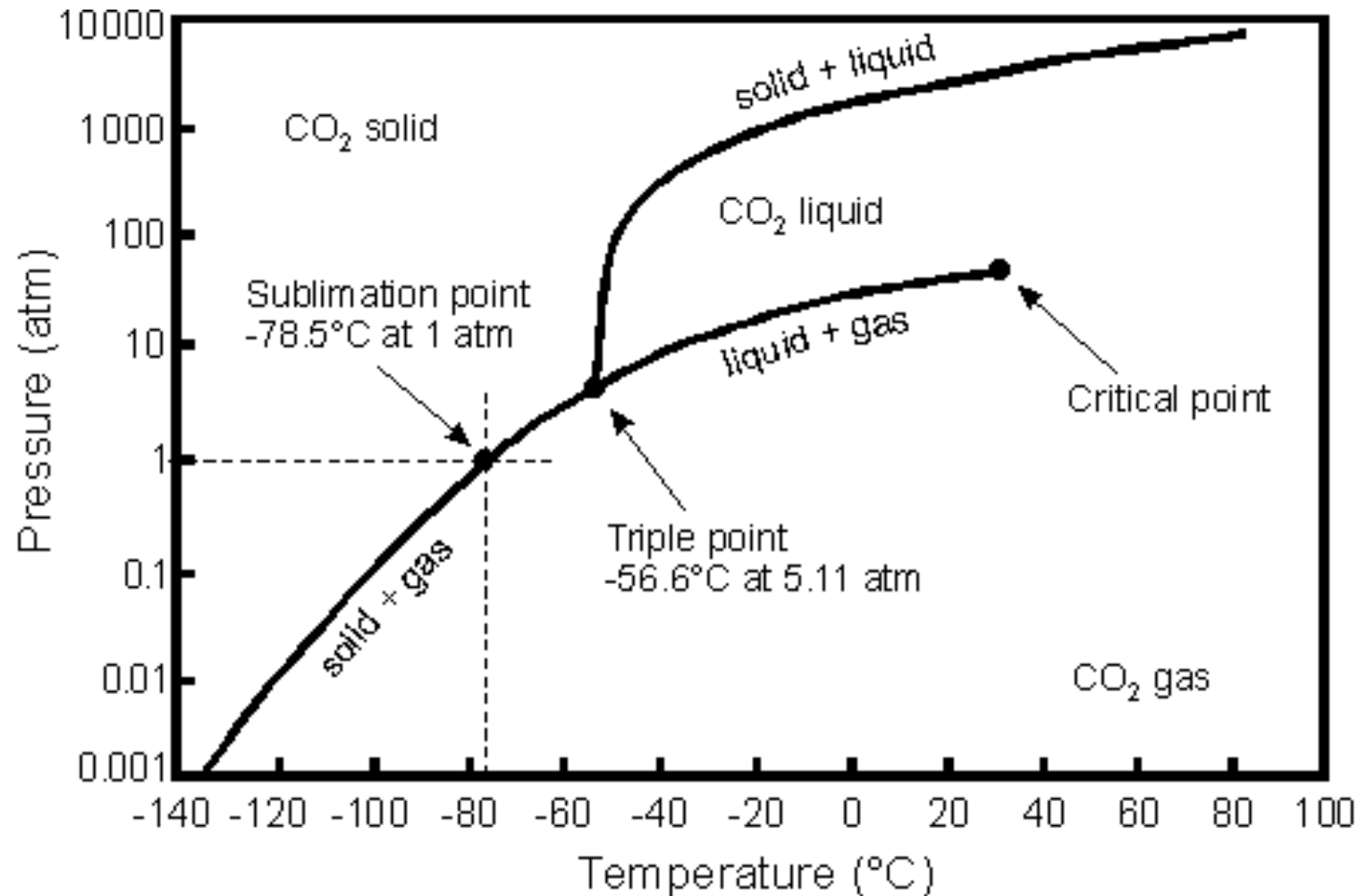
sostanza	Formula di struttura	Peso molecolare (Da)	Temperatura di fusione (°C)	Temperatura di ebollizione (°C)	Capacità termica (cal/g °C)
Acqua	H <sub>2</sub> O	18	0	100	1.0
Ammoniaca	NH <sub>3</sub>	17	- 78	- 33	0.49
Metano	CH <sub>4</sub>	16	- 182	- 161	0.53
Acido solfidrico	H <sub>2</sub> S	34	- 86	- 61	0.24

# Diagramma di fase dell'acqua



Il **punto triplo** è un particolare stato termodinamico determinato dai valori di temperatura e pressione in cui coesistono in condizioni di equilibrio tre fasi di aggregazione di una sostanza.

# Diagramma di fase della CO<sub>2</sub>



Pressure-Temperature phase diagram for CO<sub>2</sub>.

# Molecola di H<sub>2</sub>O

- Anche se l'ossigeno ha due elettroni spaiati è necessario ricorrere allo schema di ibridizzazione sp<sup>3</sup> per giustificare la sua geometria, piegata con angolo HOH=105°
- In questo caso però non si ha bisogno di eccitazione.

**Atomo O**  
config. fondamentale

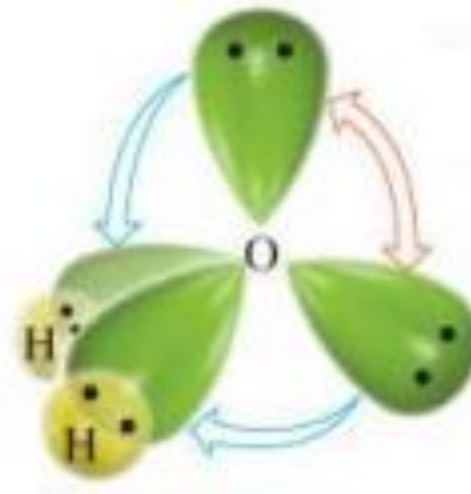


**Atomo O**  
ibridizzato



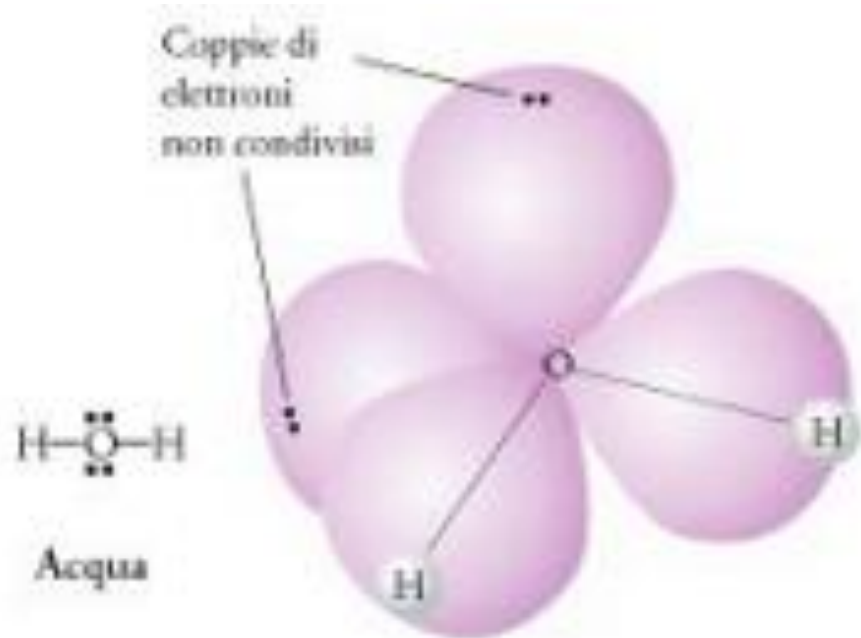
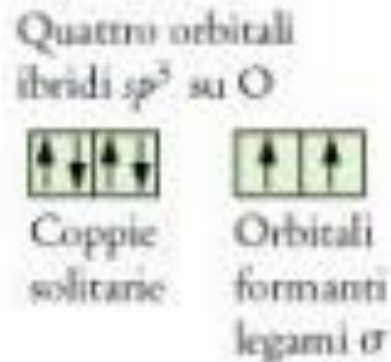
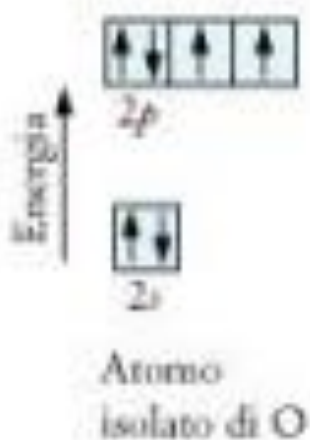
**Formazione dei 2 legami O-H**  
secondo la teoria VB per  
sovrapposizione dei due sp<sup>3</sup>  
spaiati con gli 1s dei due  
idrogeni.

**Le due coppie solitarie**  
occupano i due restanti  
orbitali sp<sup>3</sup>



**H h h h**

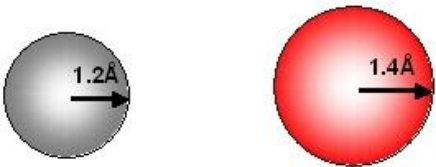
- Si noti che dei quattro orbitali  $sp^3$  due sono doppiamente occupati e costituiscono le coppie solitarie mentre due sono spaiati e formano i due legami O-H per sovrapposizione con gli orbitali spaiati  $1s$  dei due idrogeni.
- Se non si facesse uso degli ibridi  $sp^3$  i legami i legami O-H sarebbero formati dalla sovrapposizione di due orbitali  $2p$  con gli  $1s$  degli H e l'angolo HOH dovrebbe essere di  $90^\circ$  (cioè quello tra due orbitali  $p$ ) in disaccordo col valore sperimentale



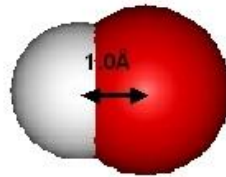


# La molecola d'acqua

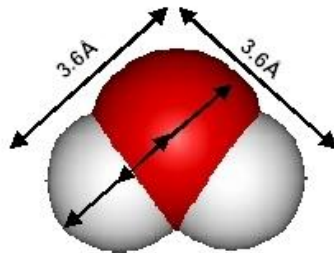
van der Waals radii of H and O atoms:



Bonded distance of H and O atoms:



Overall size and shape of a water molecule:



L'acqua è una molecola polare:

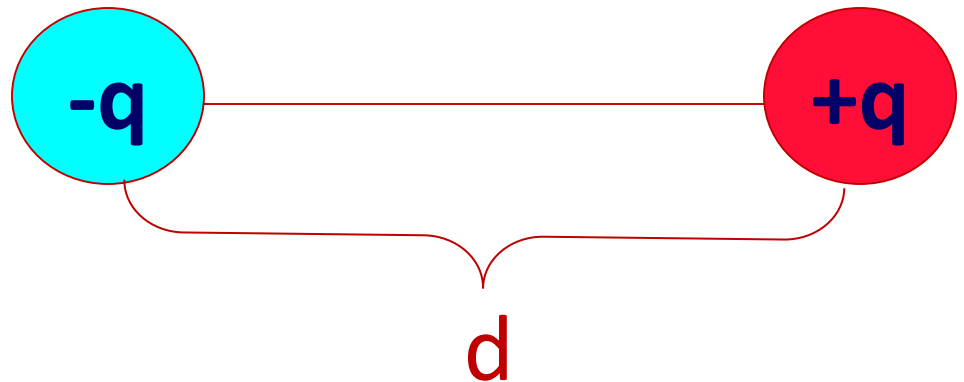
La differente elettronegatività dell'ossigeno e dell'idrogeno e la geometria della molecola conferiscono alla molecola d'acqua una polarità.

Nella molecola d'acqua l'atomo di ossigeno attrae gli elettroni degli atomi di idrogeno: ciò dà luogo ad una distribuzione asimmetrica di carica elettrica sulla molecola, creando un dipolo elettrico

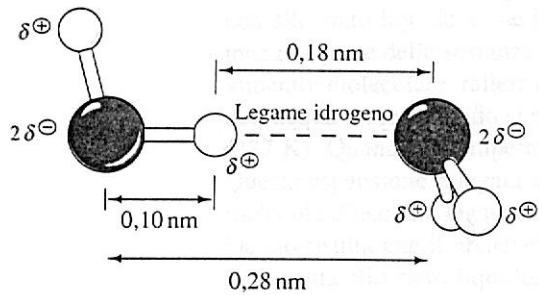
# Momento di dipolo

- Il momento di dipolo,  $\mu$ , è dato da:
  - La carica elettrica,  $q$
  - La distanza che separa,  $d$

$$\mu = q \cdot d$$

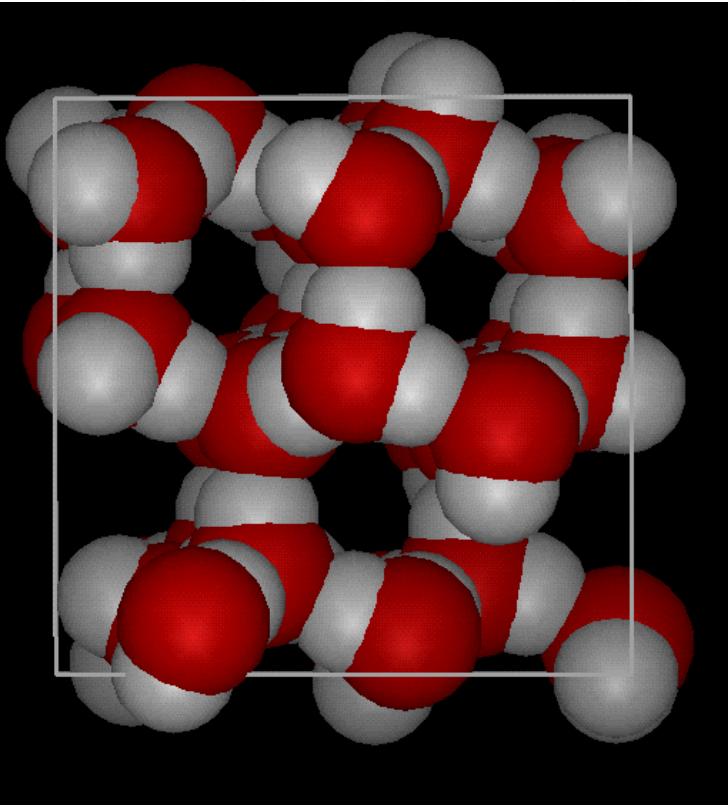


Il momento di dipolo è misurato in Debye  
dove  $1 \text{ D} = 3.33 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$

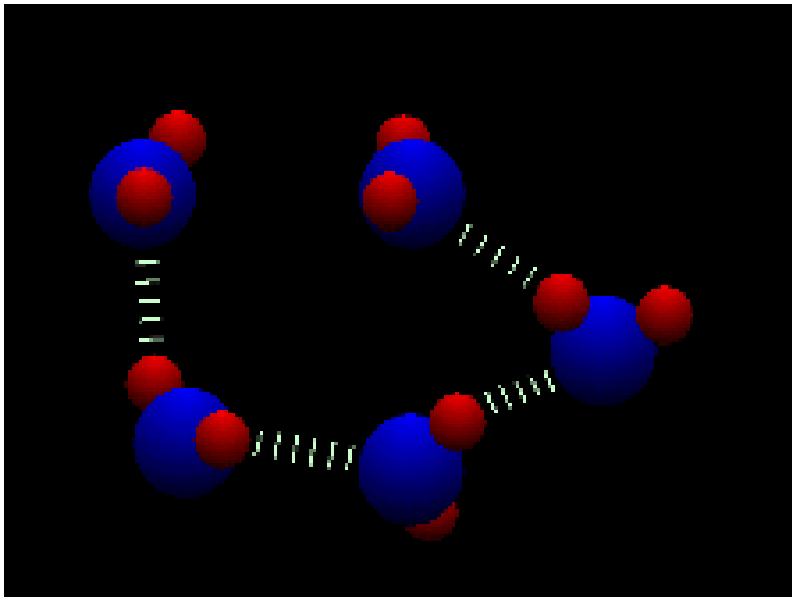


# Il legame idrogeno

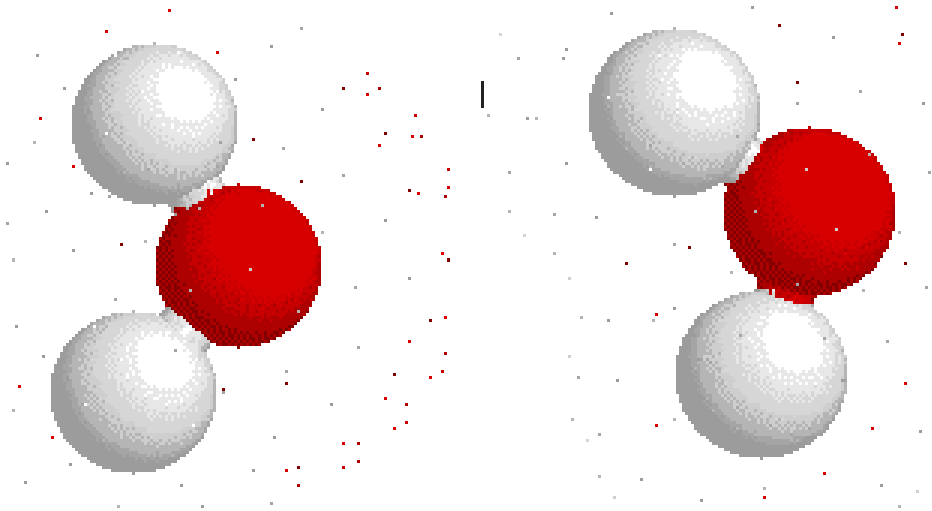
- Energia di legame  $\cong 5$  kcal/mol
- Strettamente direzionale
- L'energia di legame è inversamente proporzionale al quadrato della distanza tra i nuclei interagenti
- Ogni molecola d'acqua è in grado di formare 4 legami idrogeno (nel ghiaccio)



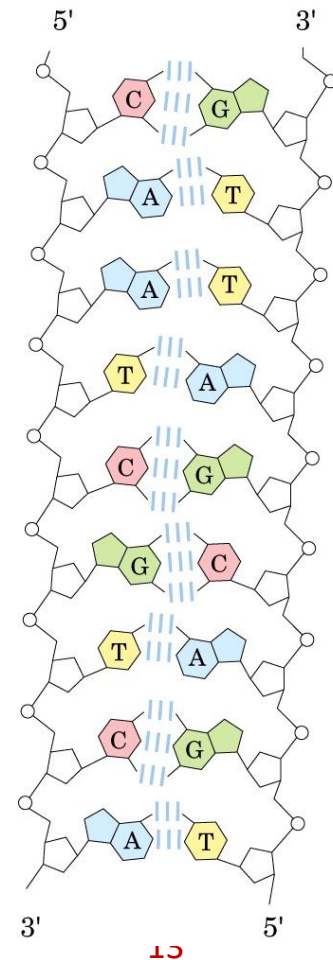
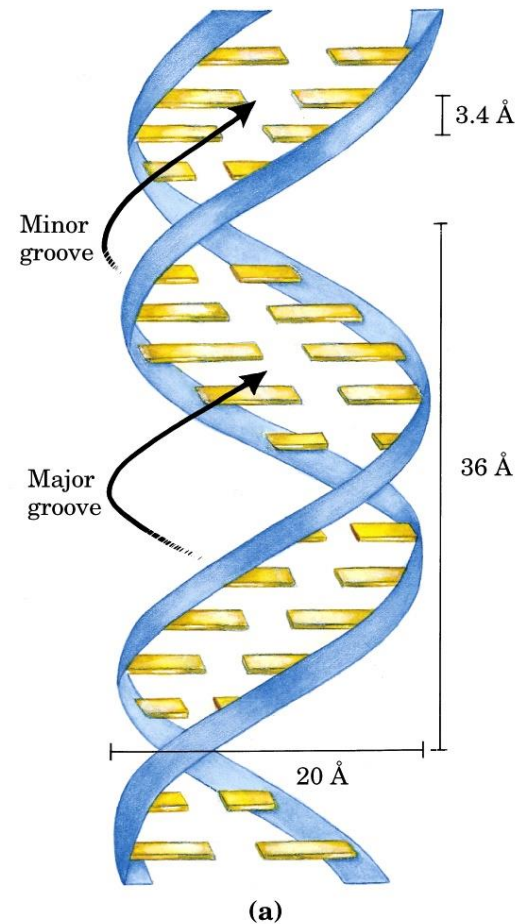
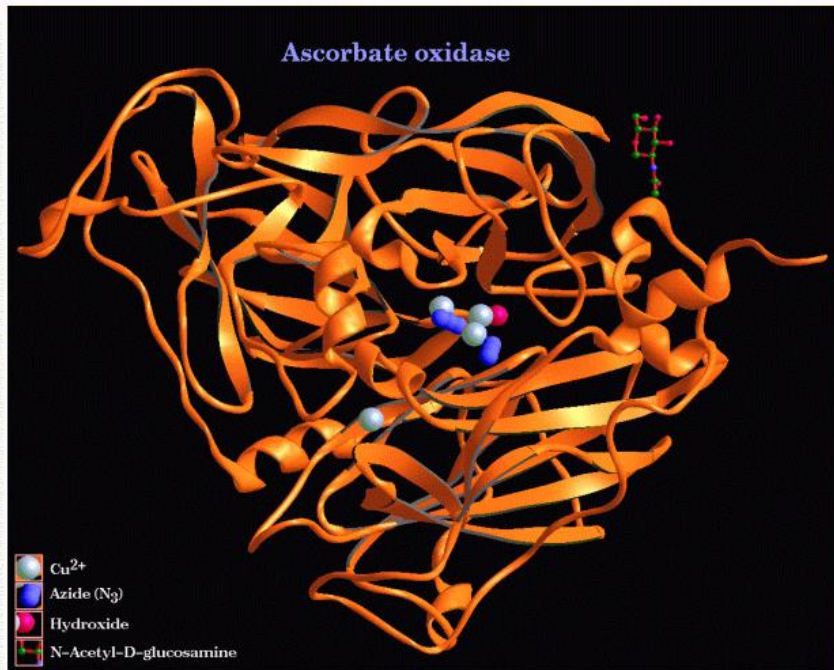
# Direzionalità del legame idrogeno



- L'attrazione elettrostatica tra le molecole d'acqua tende ad orientarle in modo che il legame O-H di una molecola punti verso l'atomo di ossigeno della molecola vicina.

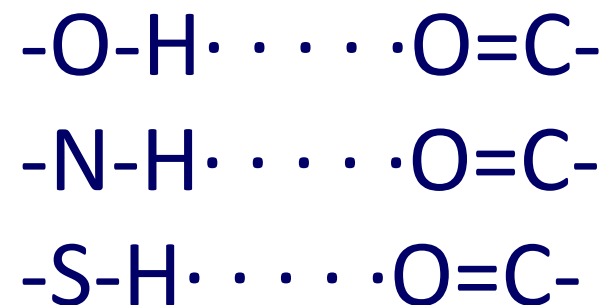
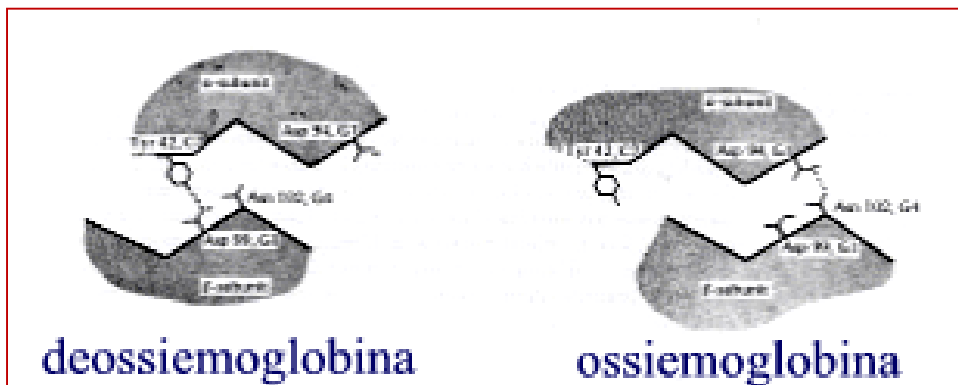


# I legami idrogeno sono fondamentali nel determinare la struttura di DNA e proteine

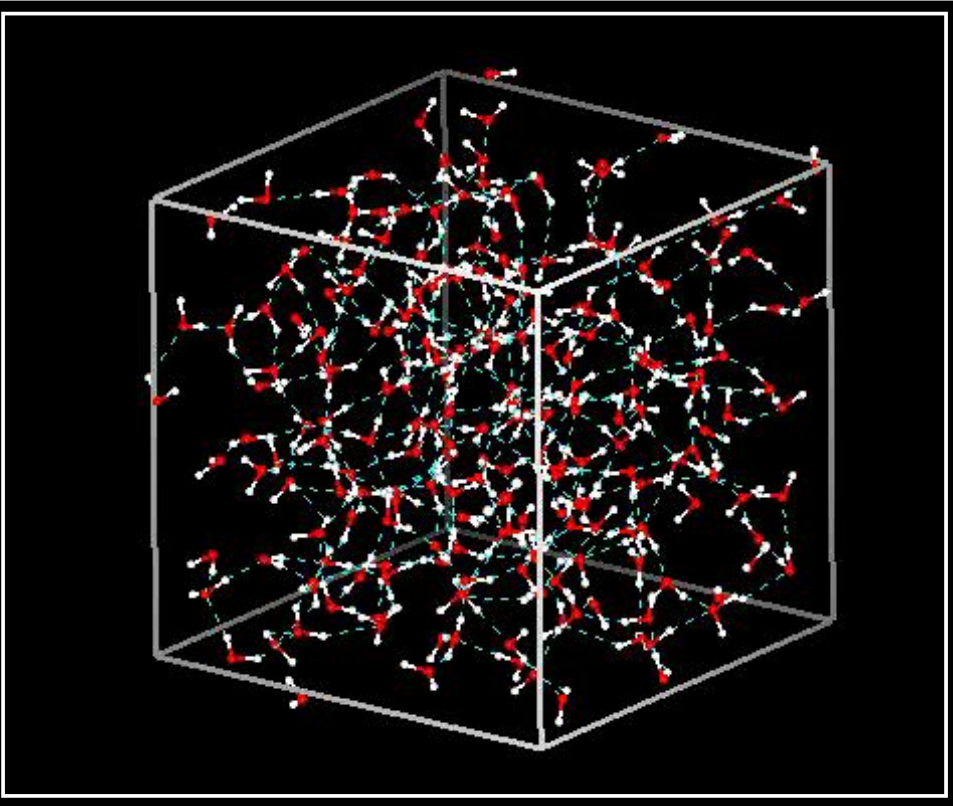


# I legami idrogeno sono fondamentali nel determinare la struttura tridimensionale delle macromolecole

- In alcune patologie l'emoglobina presenta una alterazione di un amminoacido che non consente la formazione corretta di un legame idrogeno
- Tale alterazione comporta un differente capacità dell'emoglobina di legare l'ossigeno



# L'acqua liquida

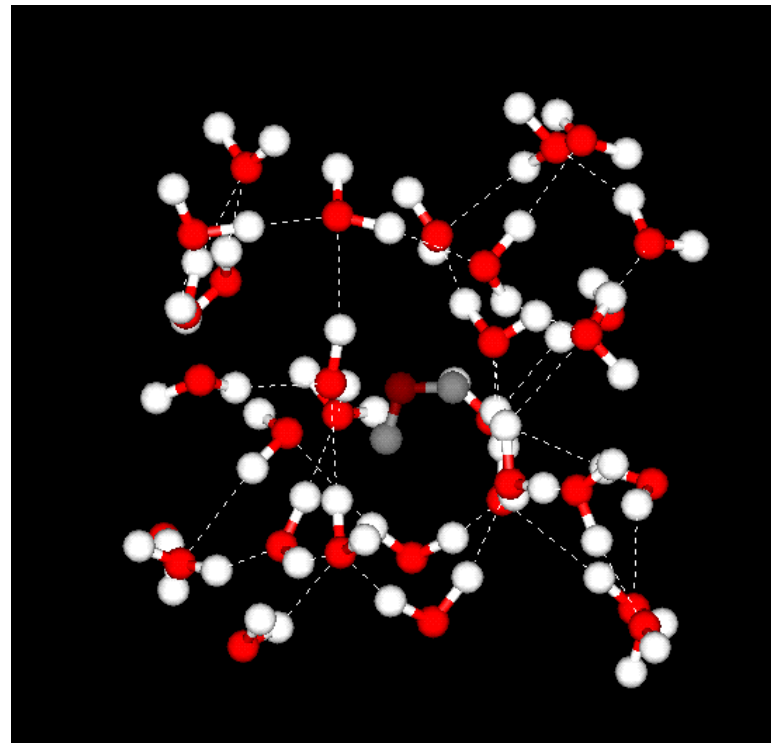
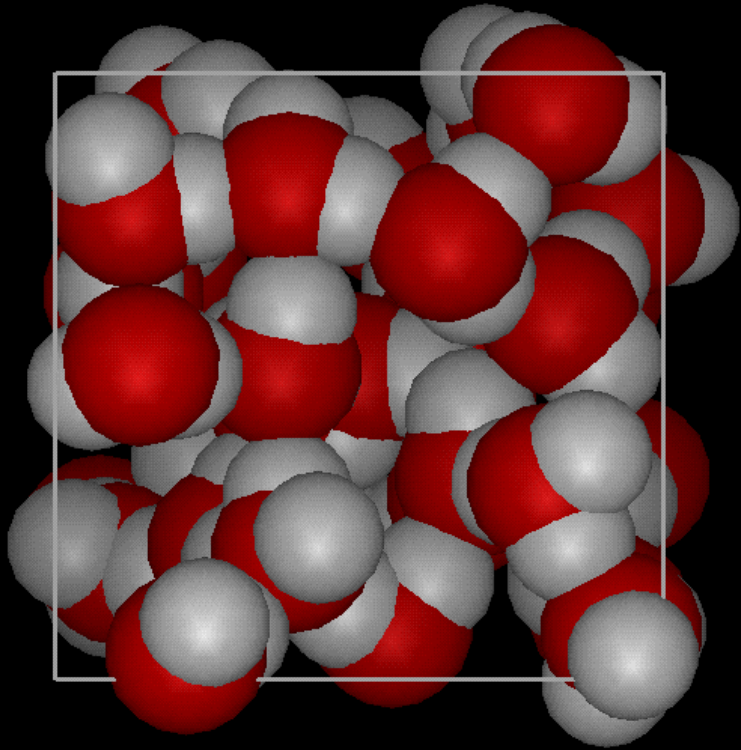


- I legami idrogeno permangono anche in fase liquida
- Ad ogni molecola d'acqua sono legate mediamente 4.4 altre molecole
- È un sistema dinamico in rapido movimento
- Ogni molecola d'acqua ruota attorno a se stessa mille miliardi di volte al secondo
- Oltre alla rotazione compie modi di vibrazione e di traslazione



# L'acqua liquida

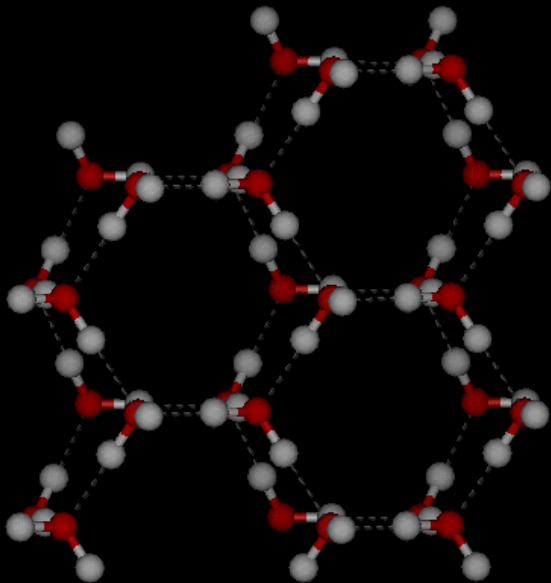
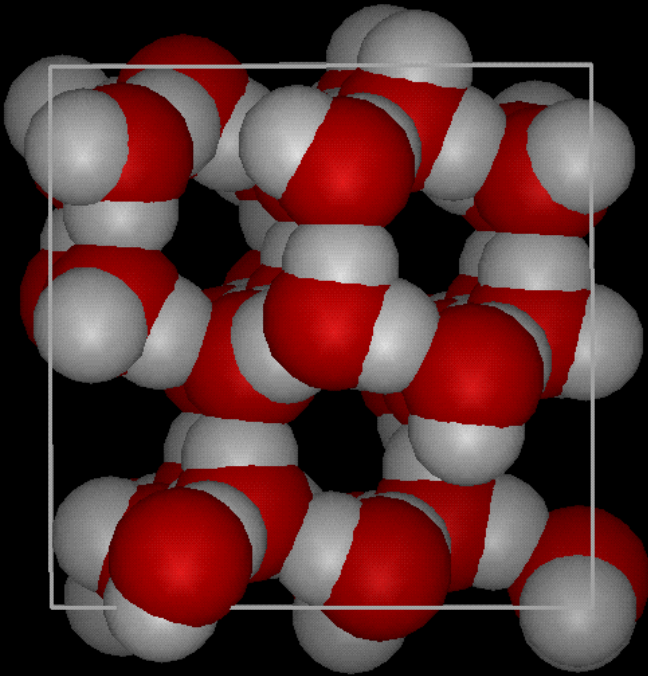
- Ad ogni molecola d'acqua mediamente sono legate 4.4 altre molecole



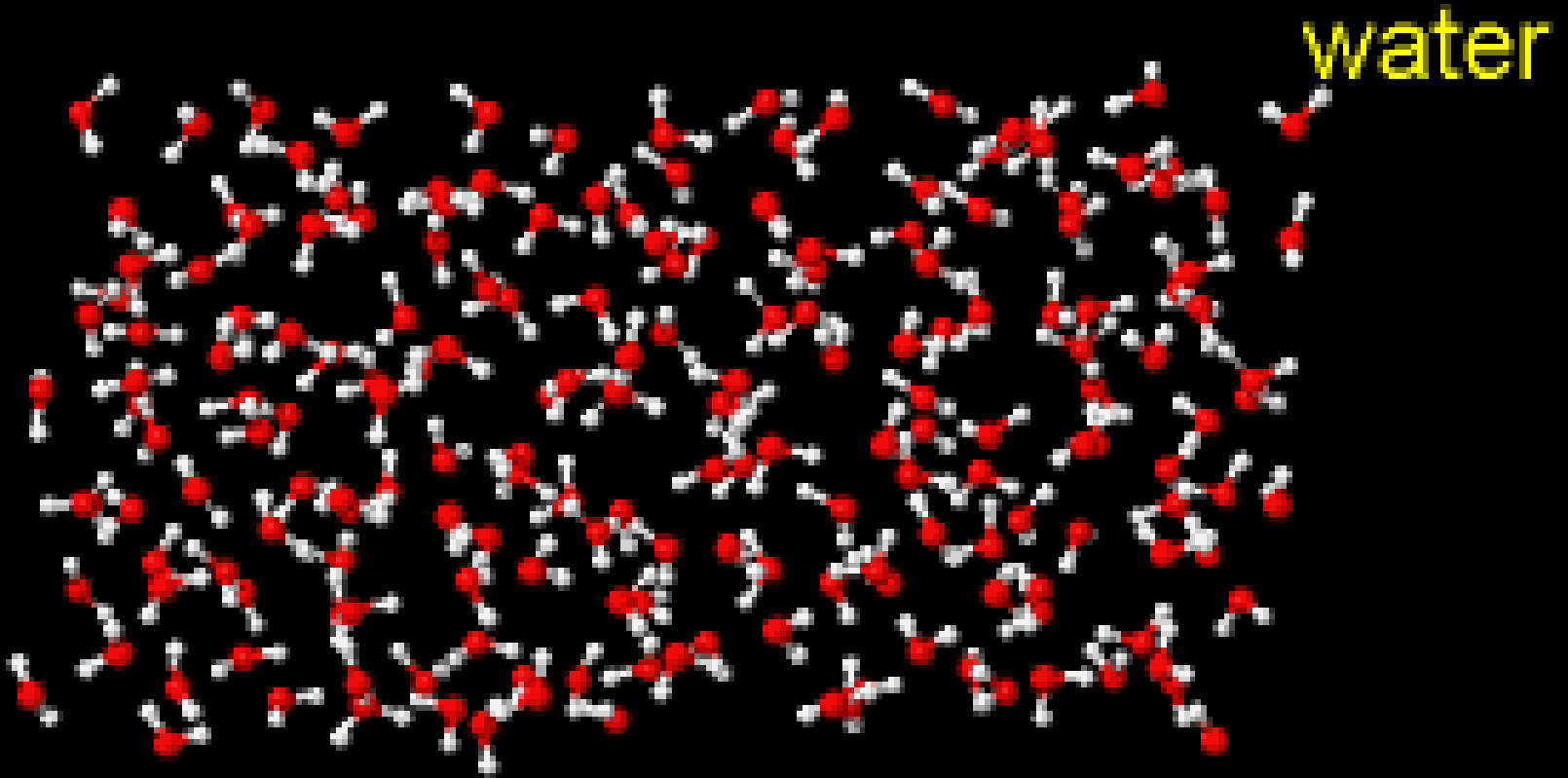


# L'acqua solida (ghiaccio)

- Ogni molecola d'acqua è legata ad altre 4 molecole in modo ordinato
- Le molecole sono unite mediante legami idrogeno
- Il ghiaccio possiede una densità di 0.91 kg/L

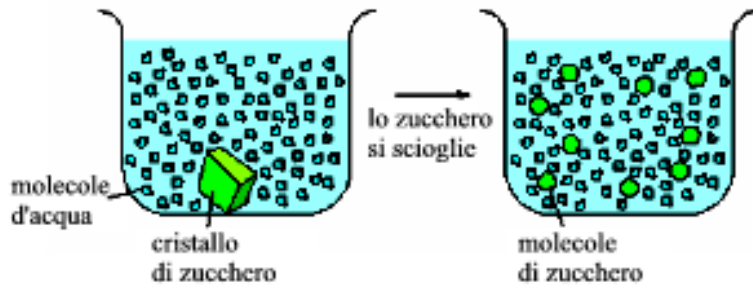
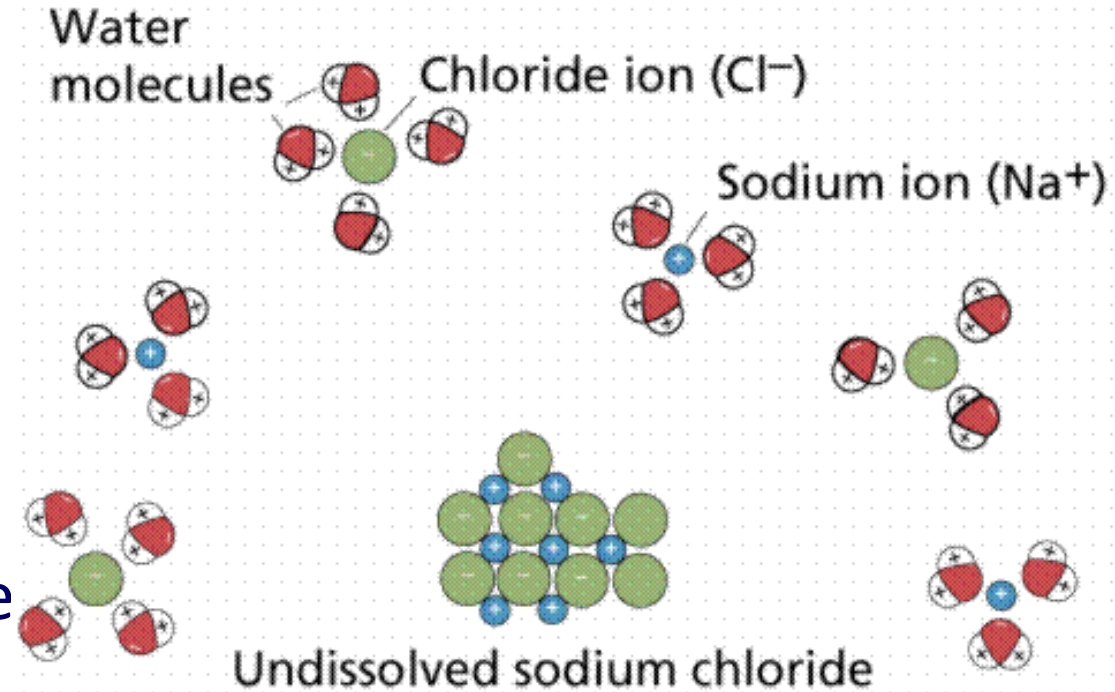


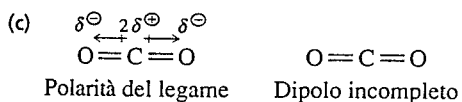
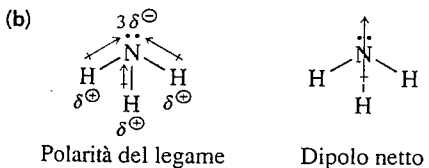
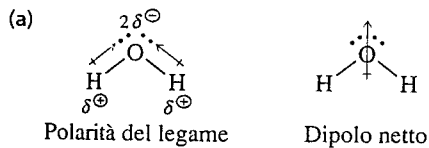
# Il congelamento



# L'acqua come solvente

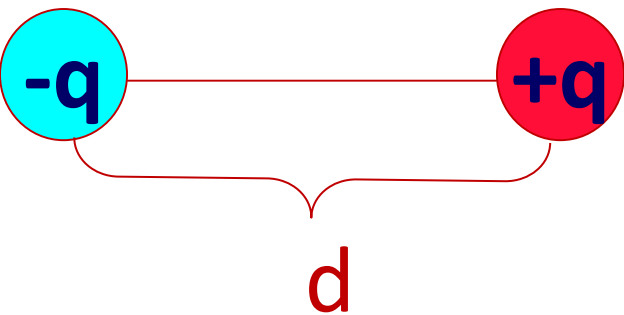
- L'acqua è un ottimo solvente per le sostanze ioniche e polari



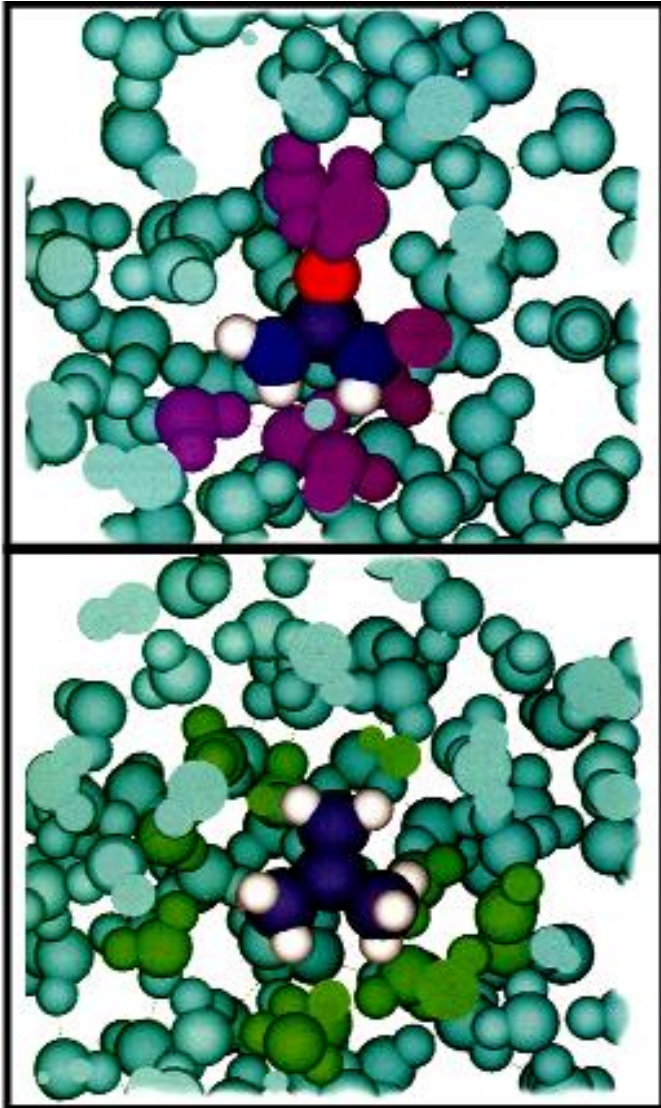


# La costante dielettrica

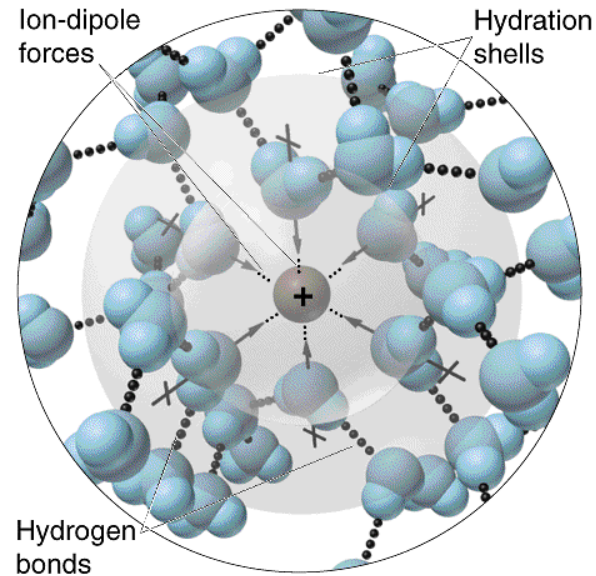
sostanza	Formula di struttura	Momento di dipolo (Debye)	Costante dielettrica (e)
Acqua	H <sub>2</sub> O	1.84	78.5
Ammoniaca	NH <sub>3</sub>	1.47	16.9
Metano	CH <sub>4</sub>	0	1.7
Acido solfidrico	H <sub>2</sub> S	0.97	9.3



# La solvatazione



- Indebolimento delle interazioni elettrostatiche
- I dipoli costituiti dalle molecole d'acqua interagiscono con gli ioni presenti in soluzione



# La tensione superficiale



- Le molecole d'acqua sulla superficie formano un numero minore di legami idrogeno delle molecole che sono all'interno della soluzione, per cui quelle superficiali sono attratte verso l'interno

acqua



alcohol



# La capillarità



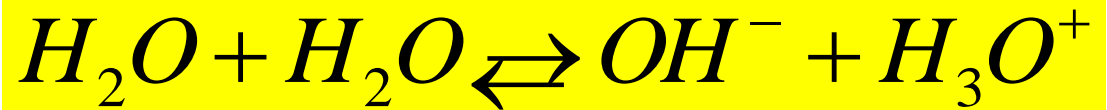
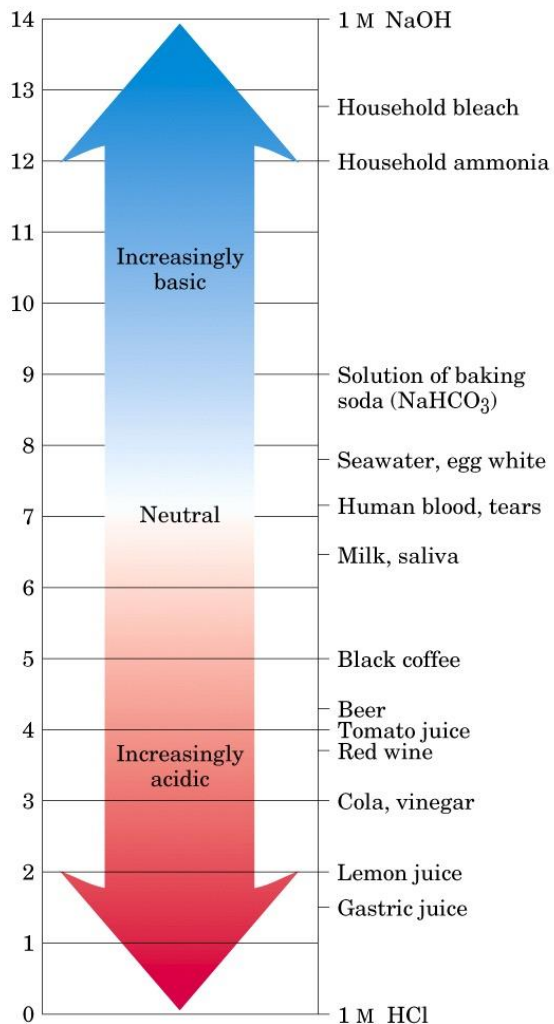
Pareti  
idrofobiche



Pareti  
idrofiliche

- È dovuta all'interazione delle molecole d'acqua con le pareti del capillare
- L'altezza della colonna di liquido dipende dalla forza delle interazioni tra l'acqua e le pareti, dalla tensione superficiale e dalla forza di gravità

# Le molecole d'acqua possono acquistare o cedere ioni $H^+$

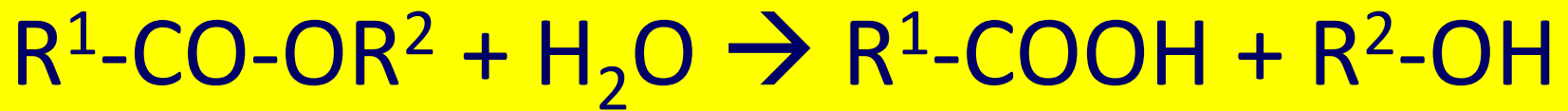


$$pH = -\log[H_3O^+]$$

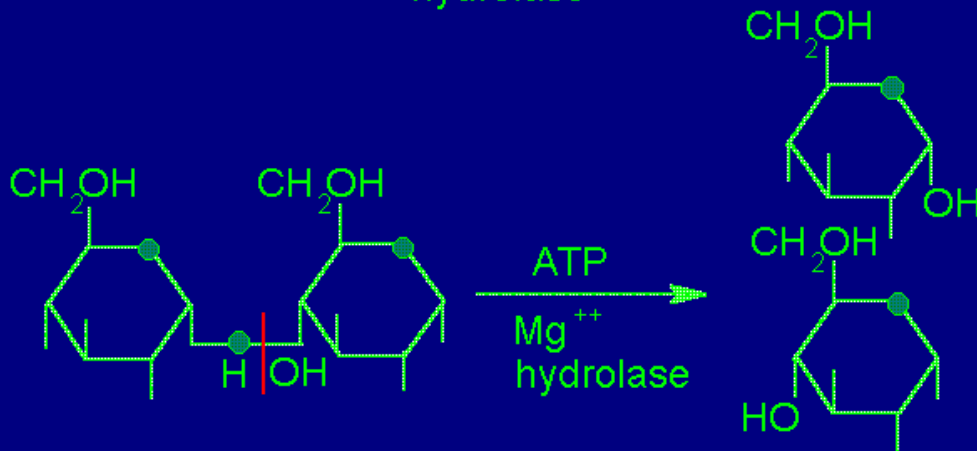
$$K_w = [OH] [H_3O^+] = 10^{-14}$$



# L'acqua non è solamente un solvente ma si comporta come reagente in numeroso reazioni



1. polysaccharides  $\xrightarrow[\text{hydrolase}]{\text{ATP, Mg}^{++}}$  monosaccharides



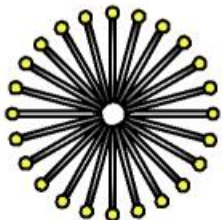
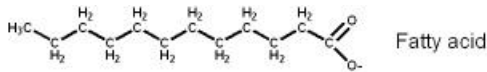
- L'acqua è in grado di reagire con numerose sostanze
- Partecipa alle reazioni di idrolisi e di ossidoriduzione

# Effetto idrofobico

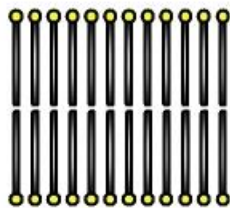


Ice-like cage of water molecules surrounding an apolar solute - a low-entropy state for these waters

- E' dovuto all'interazione tra una molecola apolare ed il solvente
- Le molecole d'acqua che circondano una molecola non polare formano una gabbia di legami idrogeno



Micelle

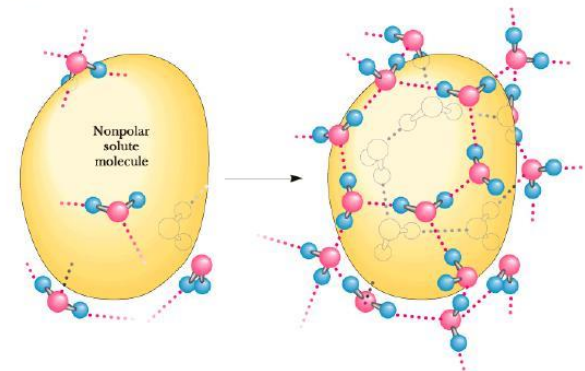


Bilayer

These structures spontaneously assemble in water

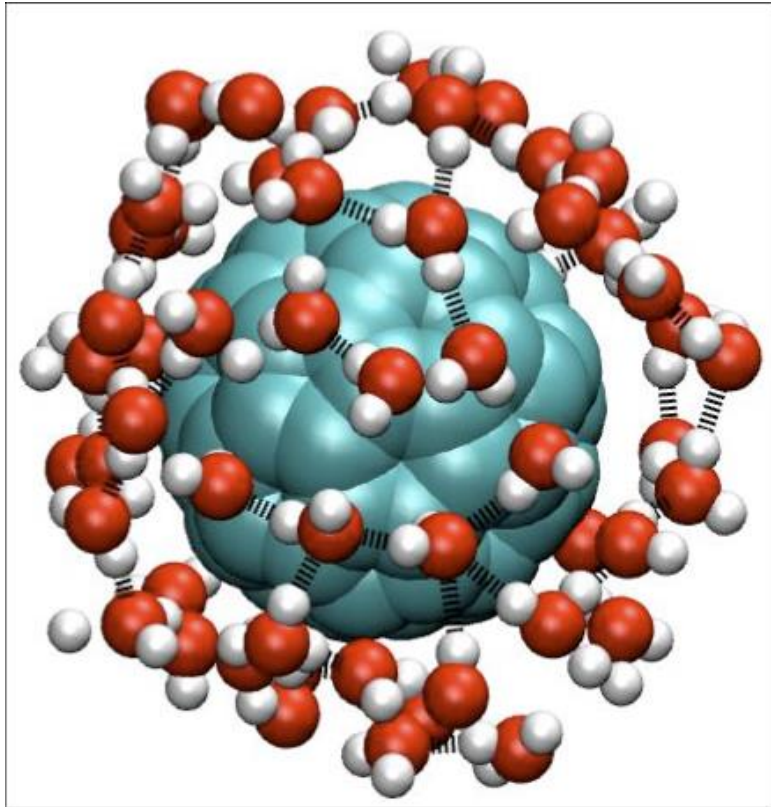
## Biochemistry 2/e - Garrett & Grisham

Garrett & Grisham: Biochemistry, 2/e  
Figure 2.5



Saunders College Publishing

# Clatrati di molecole d'acqua



# Acqua in fase liquida

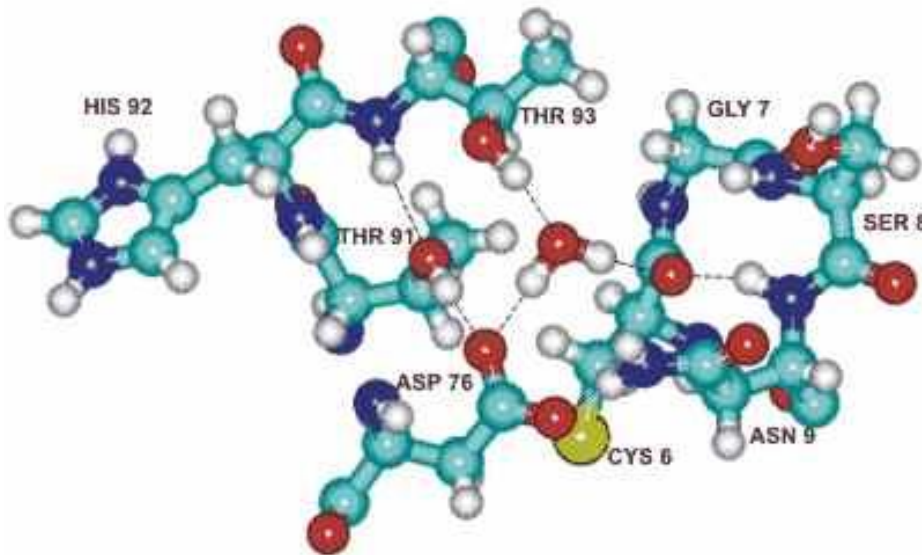


# Una situazione di minore ordine apparente macroscopico in realtà corrisponde ad una maggiore entropia a livello microscopico



- Le molecole d'acqua confinate all'interfaccia olio-acqua sono in numero minore se viene minimizzata la superficie di contatto tra le due sostanze
- Le molecole d'acqua che circondano una molecola idrofobica possiedono una minore entropia

# L'acqua e le macromolecole



- Dentro ed attorno ad ogni macromolecola sono presenti numerosissime molecole d'acqua legate ai residui amminoacidici
- L'acqua libera ed acqua legata si muovono a velocità molto differenti

# La denaturazione delle proteine



- **Il congelamento**

- La formazione di cristalli di ghiaccio ed il loro progressivo aumentare di dimensioni portano alla distruzione della struttura tridimensionale delle proteine

- **La cottura**

- Il riscaldamento rompe i legami idrogeno che mantengono integra la struttura tridimensionale delle proteine

