

UNIVERZITET CRNE GORE

Medicinski fakultet



SEMINARSKI RAD

Predmet: Hemija

Tema: Vodonične veze.

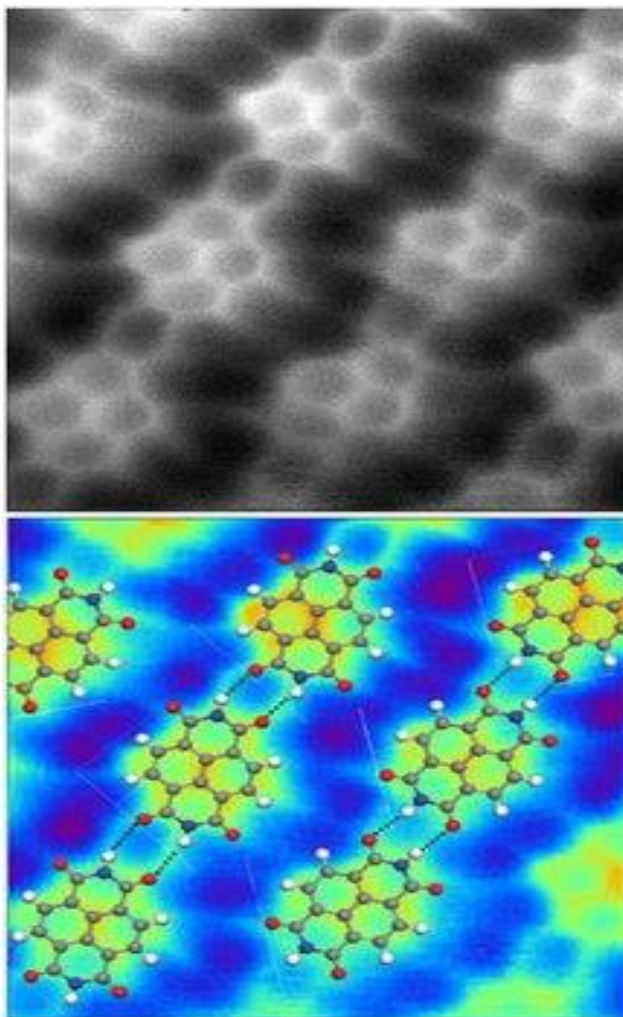
Mentor: Prof. Dr Milica Kosović Perutović Student: Sergei Iablokov 14/24

Podgorica, novembar 2024.

SADRŽAJ

SADRŽAJ.....	2
1 Uvod.....	3
2 Međumolekulske interakcije.....	3
Orijentacione sile privlačenja.....	4
Dipol-indukovani dipol interakcija	4
Disperzione sile (Londonove sile)	5
3 Vodonična veza	5
3.1 Osnovne karakteristike.....	5
3.2 Primena i primeri u prirodi	8
3.2.1 Voda	8
3.2.2 Proteini	10
3.3.3 DNK.....	11
4. Zaključak	13
Literatura.....	14

1 Uvod



Slika 1. AFM snimak naftalentetrakarbonsil diimid molekula na srebrom završenom silikonu, u međusobnoj interakciji vodoničnim vezama, na 77 K. („Vodonične veze” u gornjoj slici su preuveličane usled artefakata tehnike snimanja.) (1) (2)

Vodonične veze su široko rasprostranjene u prirodi i značajno utiču na osobine supstanci. One značajno povećavaju temperature topljenja i ključanja supstanci, utiču na njihovu rastvorljivost u vodi.

Zahvaljujući stvaranju vodoničnih veza, voda, metanol, etanol, sirćetna kiselina i mnoge druge supstance su u tečnom stanju pod normalnim uslovima.

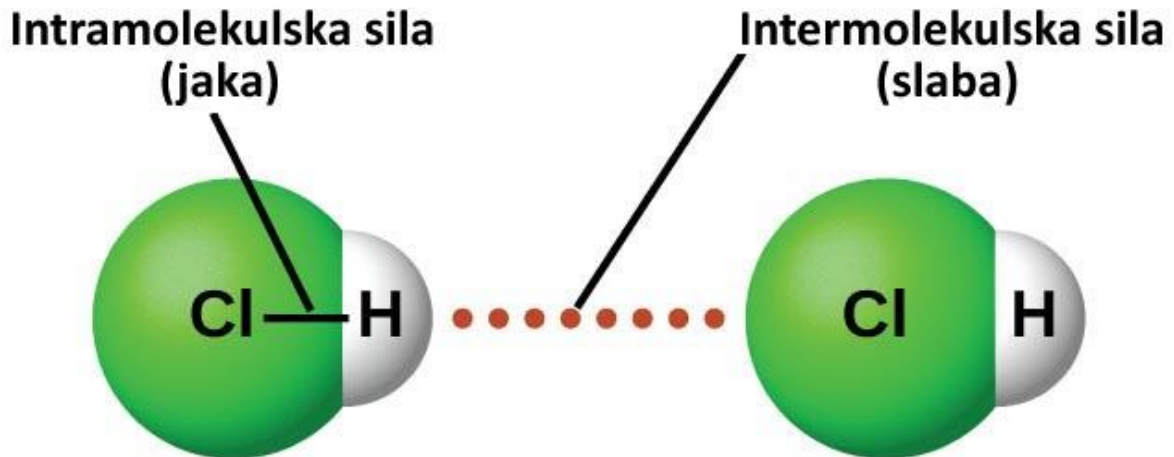
Vodonične veze omogućavaju sekundarnu (spiralnu) strukturu proteina, kao i povezivanje dva komplementarna lanca DNK u jedinstvenu celinu.

2 Međumolekulske interakcije

Razmotrimo interakcije koje se javljaju između pojedinačnih molekula u supstanci – međumolekulske interakcije . To su interakcije između neutralnih atoma, kod kojih ne nastaju nove kovalentne veze. “Sile interakcije između molekula otkrio

je Van der Vals 1869. godine, i one su nazvane po njemu – Van der Valsove sile. Van der Valsove sile dele se na orijentacione, indukzione i disperzione.” (3) Energija međumolekulskih interakcija mnogo je manja od energije hemijskih veza (slika 2).

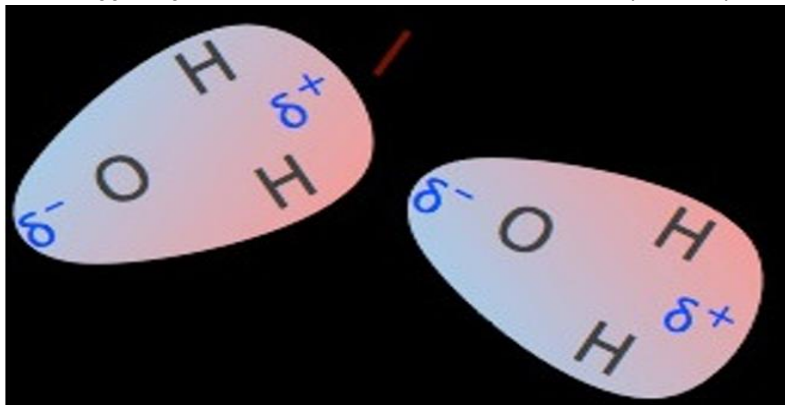
Poseban tip međumolekulske interakcije su vodonične veze, o njima niže.



Slika 2. Međumolekulske interakcije

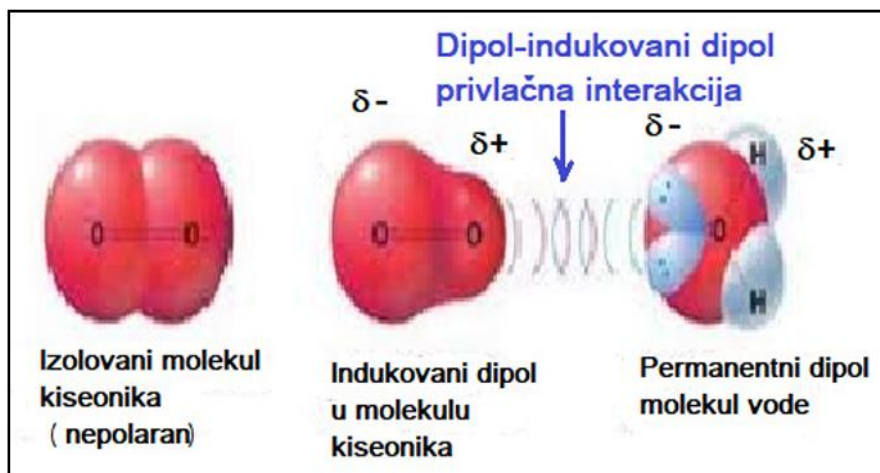
Orijentacione sile privlačenja nastaju između polarnih molekula (dipol-dipol interakcije).

Najjasniji primer tome može poslužiti voda (Slika 3)



Slika 3. Dipol-dipol interakcija između dva molekula vode.

Dipol-indukovani dipol interakcija Ako molekul ima permanentni dipolni momenat on proizvodi električno polje koje polarizuje naelektrisanje drugog molekula i tako nastaje indukovani dipolni moment u molekulu 2 (bez obzira da li drugi molekul ima ili nema permanentni dipolni moment). Dakle, generalno, privlačna interakcija između permanentnog dipolnog momenta jednog molekula i indukovanog dipolnog momenta drugog molekula (slika 4) daje dipol-indukovani dipol doprinos ukupnoj privlačnoj potencijalnoj energiji.



Slika 4. Molekul sa permanentnim dipolnim momentom (voda) indukuje dipolni moment u susednom molekulu (kiseonika).

Disperzione sile (Londonove sile) Čak i kada nijedan od molekula nema permanentni dipolni moment, postojaće privlačne interakcije između njih, Londonove. Ukoliko ne bi bilo tako, gasovi kao He ili N₂ ne bi kondenzovali do tečnosti. “Londonove sile predstavljaju interakciju (privlačnu) između tzv. trenutnog dipolnog momenta i trenutnog indukovanog dipolnog momenta. Trenutni dipoli nastaju kao rezultat fluktuacija trenutnih položaja elektrona. Elektroni su u kontinualnom kretanju u molekulu. Raspodela električne šarže u nekom trenutku vremena ne mora biti potpuno simetrična. Na primer, u nekom trenutku, oba elektrona u atomu helijuma mogu se nalaziti sa iste strane jezgra. Prvi molekul menja veličinu i pravac svog trenutnog dipola, ali elektronska raspodela drugog molekula prati te promene, tako da postoji prosečna privlačna interakcija koja nije nula” slika 5. (4)



Slika 5. Londonova privlačna interakcija između dva trenutna dipola.

3 Vodonična veza

3.1 Osnovne karakteristike

“ Mnoga jedinjenja, koja sadrže vodonik u svom molekulu, pokazuju niz specifičnih osobina, koje se ne mogu objasniti postojanjem samo van der Valsovih međumolekulskih

interakcija. Takva jedinjenja imaju povišene tačke ključanja, toplote isparavanja, dielektrične konstante, provodljivosti, itd., u odnosu na one osobine koje bi se očekivale prema njihovim molekulskim masama. To su na primer, alkoholi, karbonske kiseline, amidi, voda, amonijak i druga. Dva izomerna jedinjenja bruto formule C_2H_6O , dimetil-eter, CH_3O-CH_3 etil alkohol, CH_3CH_2OH imaju veoma različite osobine: etar ključa na $-24^\circ C$, a alkohol na $+78^\circ C$. Toplota isparavanja etra je oko 20 kJ/mol , a alkohola 40 kJ/mol . Ove dve osobine u bliskoj su vezi sa molekulskom masom, pa bi se očekivalo da za ova dva jedinjenja budu približnih vrednosti. Slično, jedinjenja bruto formule $C_2H_5NO_2$ i NH_2COOCH_3 imaju drastično različite osobine: nitro-etanska ključna tačka je na $115^\circ C$ i slabo je rastvorljiv u vodi, dok je rastvorljivost u vodi metil-karbamida visoka i on se topi na $177^\circ C$ i lako je rastvorljiv u vodi.

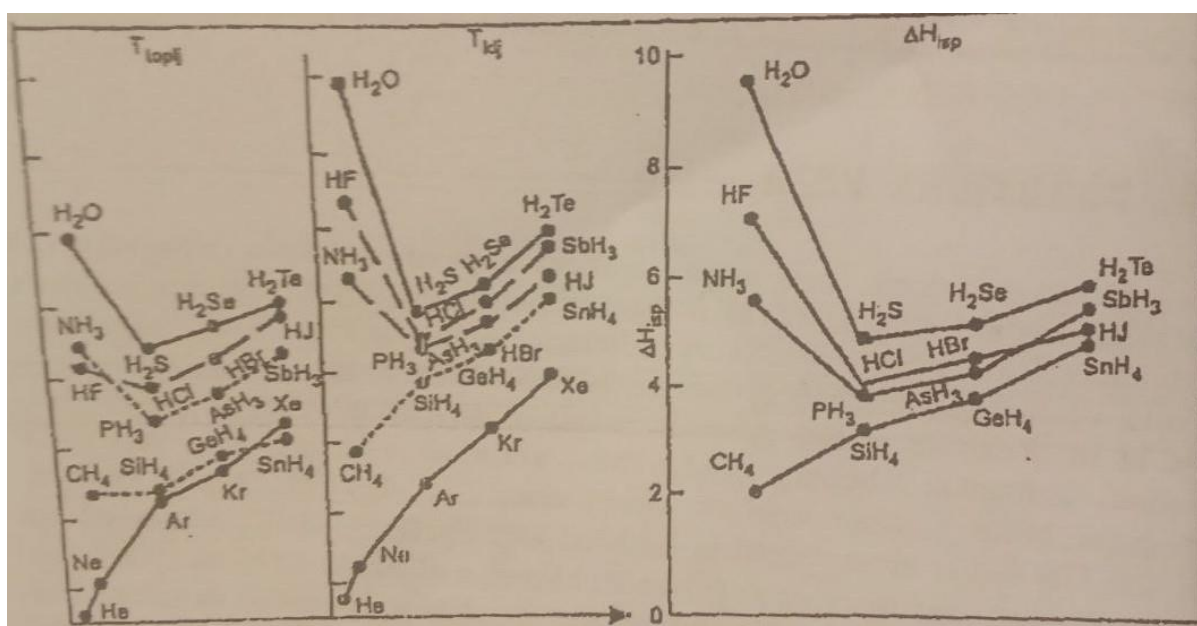
Dalja indikacija o postojanju specifičnih međumolekulskih interakcija može se dobiti posmatranjem zavisnosti tačke ključanja takvih jedinjenja i vrste:

Hidrid IV grupe: CH_4 , SiH_4 , GeH_4 , SnH_4

Hidrid V grupe: NH_3 , PH_3 , AsH_3 , SbH_3

Hidrid VI grupe: H_2O , H_2S , H_2Se , H_2Te

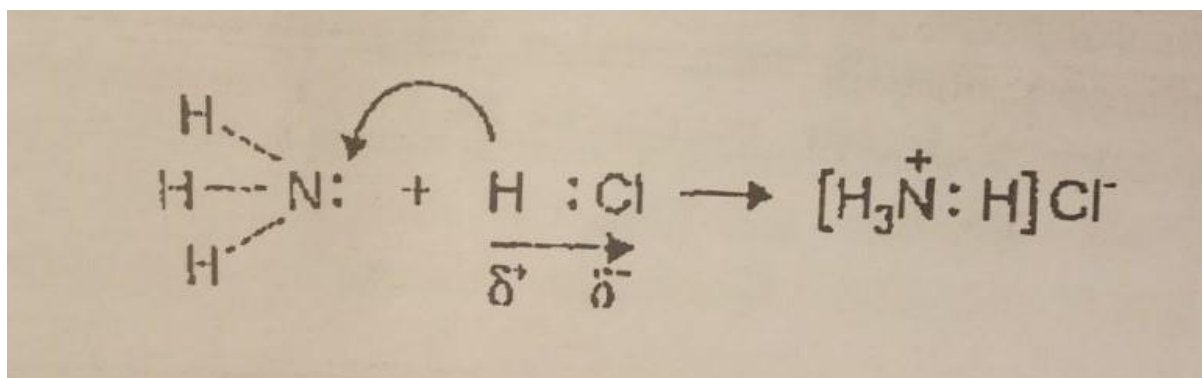
Hidrida VII grupe: HF , HCl , HBr , HI .



Slika 6. Termodinamičke osobine hidrida IV, V, VI i VII grupe periodnog sistema elemenata

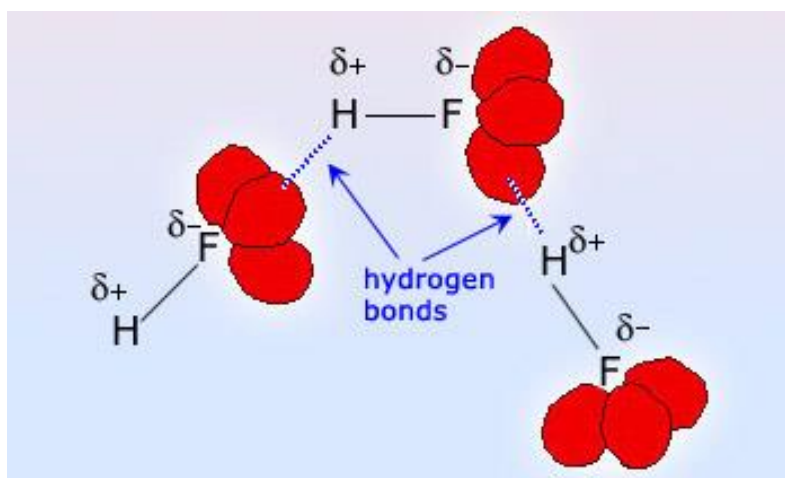
Sa slike 6. se može videti da tačke topljenja i ključanja u seriji plemenitih gasova pravilno rastu sa porastom njihove atomske težine. Isto tako tačke ključanja, mržnjenja i toplote isparavanja monotono rastu sa porastom molekulske mase hidrida IV grupe. Takve pravilnosti očekuju se za serije homolognih jedinjenja. Kod hidrida V grupe uočava se anomalno ponašanje amonijaka, koji ima višu tačku topljenja, tačku ključanja i toplotu isparavanja. U VI grupi anomalno ponašanje pokazuje voda, dok u VII grupi tako se ponaša HF, mada i ostali halogenovodonici imaju, u odnosu na svoju molekulsku masu, povišene vrednosti navedenih osobina.

Sve navedene pojave ukazuju da između molekula osim Van der Valsovih sila moraju delovati i druge međumolekulske interakcije u kojima učestvuje vodonik. Te sile javljaju se između molekula u kojima je vodonik vezan za neki jako elektronegativni atom kao što je F, N, O ređa S. U tim molekulima vodonik ima izražito elektro-pozitivni karakter. Elektro-negativni atom jednog molekula uvek ima jedan ili više nesparenih elektrona koji mogu da privuku proton. Ako je veza protona sa drugim atomom (u drugom molekulu) jako polarizovana, doći će do prenosa protona sa drugog molekula na prvi, tj. sa proton-donora na proton-akceptor, kao u slučaju reakcije između NH_3 i HCl . Slika7.” (5)



Slika 7.

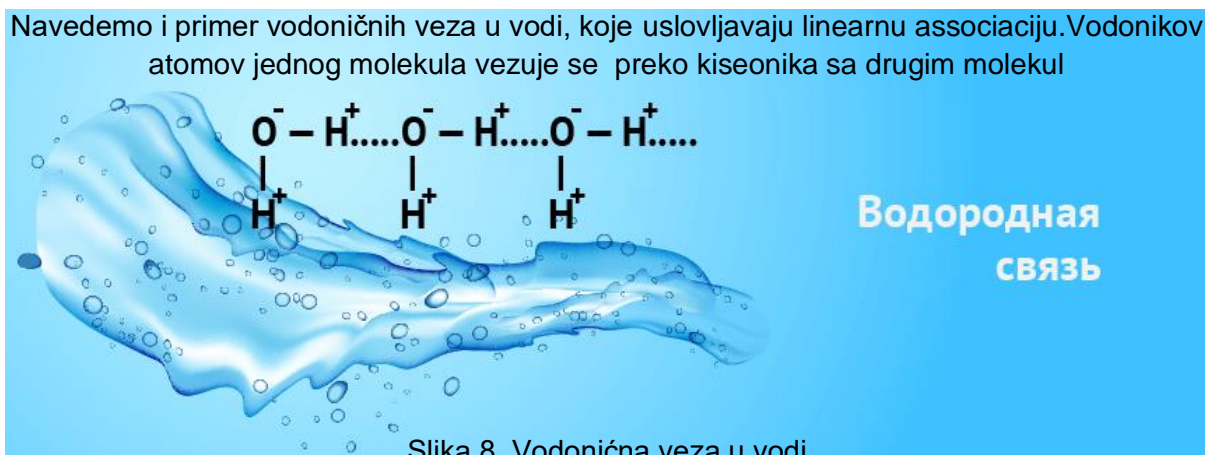
“Vodonična veza u izvesnoj meri podseća na semipolarnu vezu. Kod fluorovodonične kiseline, jako elektronegativan fluor, koji je vezan elektrovalentnom vezom, osiromašuje vodonik u elektronskom pogledu i stoga jon vodonika može lako da primi elektronski par drugog jona fluora. Veza između drugog fluora i vezanog vodonika, iako podseća na semipolarnu vezu, razlikuje se od nje manjom količinom energije i većim rastojanjem atoma. Vodoničnom vezom se objašnjava asocijacija fluorovodonika i pojava da je fluorovodonična kiselina slaba i dvobazna, iako bi, po položaju fluora u periodnom sistemu, trebalo da bude jednobazna i najjača od svih halogenovodoničnih kiselina.”(Slika 8) (6)



Slika 8. Vodonične veze između molekula HF

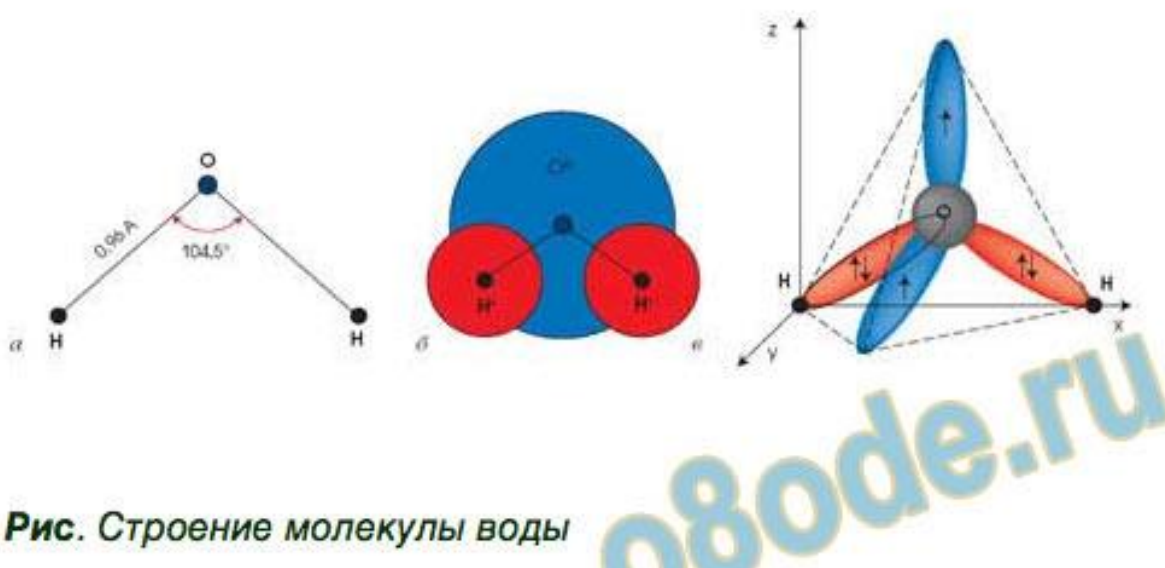
3.2 Primena i primeri u prirodi

3.2.1 Voda



Slika 8. Vodonična veza u vodi

Veze između kiseonikovog i vodonikovih atoma u vodi su, kao što smo već istakli, polarno kovalentne. "Ugao između dve kovalentne O–H veze, koji je eksperimentalnim putem određen, iznosi $104^{\circ}27'$ (Slika 9). Međutim, ova se vrednost ne slaže sa očekivanim uglom od 90° koji treba da nastane preklapanjem dve međusobno upravne kiseonikove atomske 2p-orbitale sa 1s-orbitalama H-atoma, kao što je slučaj kod H_2S , gde ovaj ugao (92°) neznatno odstupa od očekivane vrednosti (90°). Odstupanje ugla od očekivane vrednosti kod vode objašnjava se jačim elektrostatičkim odbijanjem H-atoma. Dobijena vrednost ugla ($104^{\circ}27'$) predstavlja "ravnotežni ugao" između uglova od 180° koji teže međusobno da zauzmu H-atomi, odražavajući se tako što daju jedan od drugog, i ugla od 90° koji je karakterističan za preklapanje p-orbitala O-atoma. Rastojanje između jezgra O–H iznosi oko 0,1 nm, a između vodonikovih jezgara oko 0,15 nm.



Slika 9. Građa molekula vode

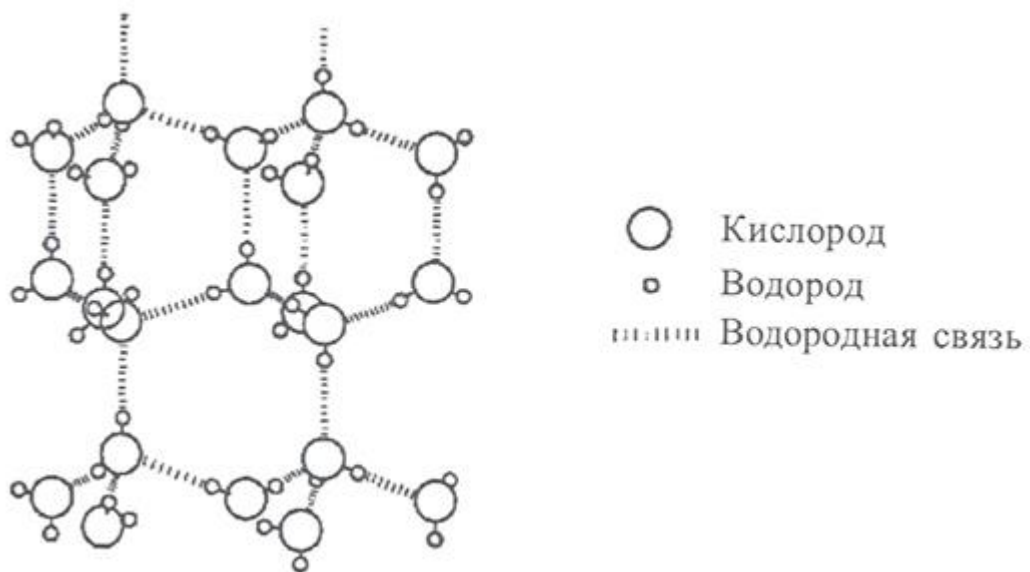
Potpuno čista voda praktično ne provodi električnu struju, ali prisustvo male količine ugljene kiseline ili neke soli omogućava da se konstatuje njena provodljivost.

Kod supstanci koje sadrže jedan ili više H-atoma vezanih za atome elemenata koji su elektronegativniji od vodonika, javljaju se posebno privlačne sile. Takav je slučaj na primer, sa vodom, amonijakom i metanom.” (7)

Pored međumolekulske vodonične veze, koja povezuje pojedinačne molekule, postoji i unutar-molekulska vodonična veza, koja povezuje atom vodonika sa nekim atomom iste molekule. Ova vrsta veze je posebno karakteristična za mnoge organske supstance (aminokiseline, proteine, amide, višeatomne alkohole i dr.).

3.2.2 Led

Na temperaturama iznad nule po Celzijusovoj skali, ali ispod tačke ključanja, molekuli vode formiraju strukture slične prikazanoj na slici 9, ali te strukture predstavljaju odvojene konglomerate, a ne jedinstvenu celinu. Na niskim temperaturama voda prelazi u led, u kojem su vodonične veze potpuno izražene, formirajući kristalnu rešetku.” Čelije rešetke su veće od molekula vode, što omogućava još jednu zanimljivu osobinu – manju gustinu u čvrstom agregatnom stanju. Mreža veza između molekula vode u ledu sadrži mnogo velikih šupljina, koje su veće od samih molekula. Upravo zbog toga led ima manju gustinu od tečne vode. Tokom topljenja leda, vodonične veze počinju da se raskidaju, a u šupljinama preostalih asocijata smeštaju se oslobođeni molekuli vode.” (12) Slika 10



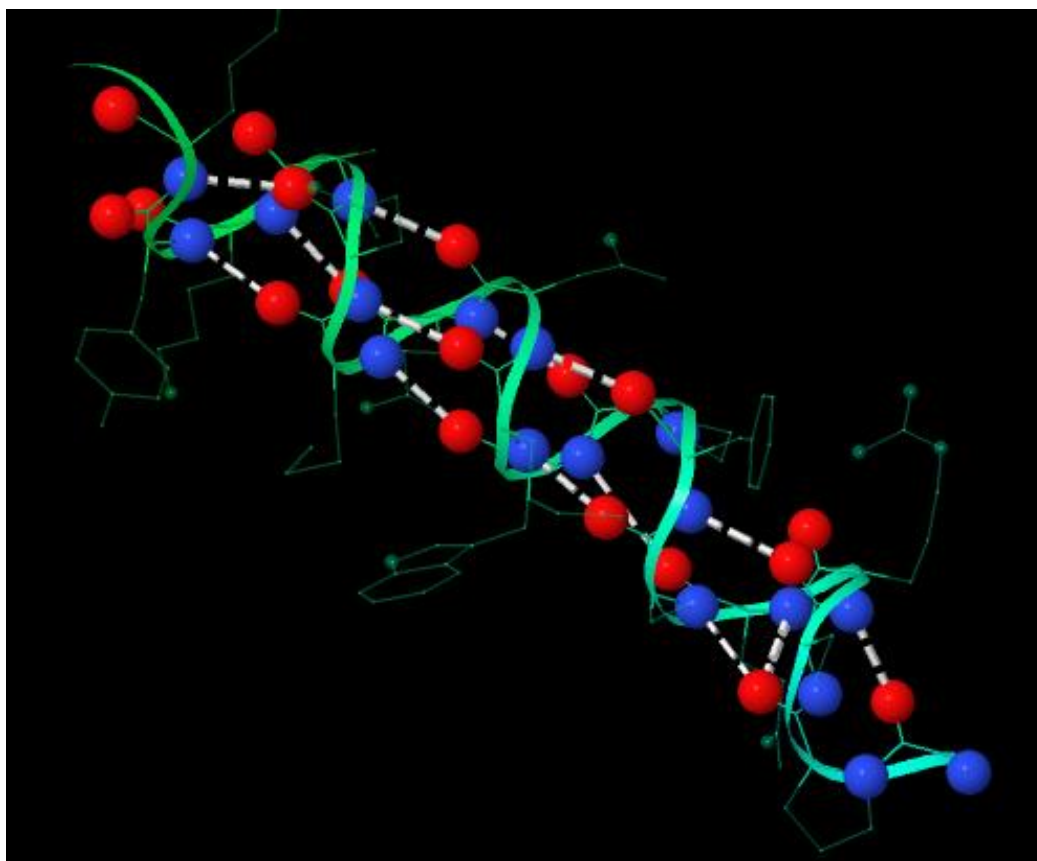
Slika 10. Tetraedarsko okruženje molekula vode u kristalu leda

3.2.2 Proteini

Vodonične veze igraju ključnu ulogu u održavanju sekundarne strukture proteina. Kada se formira ovaj tip veze, vodonični atom se deli između dva elektronegativna atoma (na primer, kiseonika u vodi). Vodonik jedne molekule je bliži elektronegativnom atomu druge molekule nego što bi to dozvolilo Van der Valsovo dejstvo.

Same po sebi, vodonične veze su vrlo slabe, ali zahvaljujući činjenici da se u proteinima formiraju u velikom broju, njihov ukupni doprinos očuvanju sekundarne strukture je vrlo značajan.

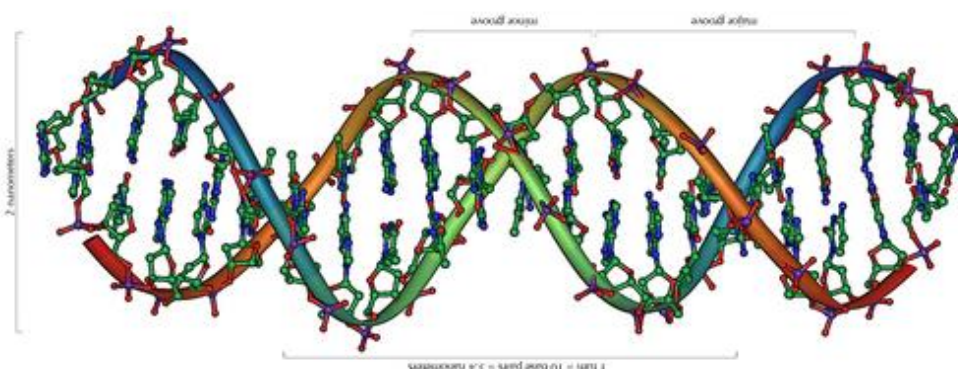
“U proteinima, vodonične veze se formiraju između karbonilne grupe jednog ostatka amino kiseline i amino grupe drugog. U alfa-spiralama, vodonične veze formiraju okvir, nastajući između i -tog ostatka i $(i+4)$ -tog ostatka.” (8) (Slika 10)



Slika 10. Secundarna structura proteina stabilizovanog vodoničnim vezama. Bazni atomi kiseonika su crvene, azota plave kuglice.

3.3.3 DNK

“U radu (9), Dž. Votson i F. Krik su napisali : „Predložili smo strukturu u kojoj su dva lanca uvijena oko zajedničke ose i povezana međusobno vodoničnim vezama između nukleotidnih baza. ... Oba lanca formiraju desnorotacione spirale, ali sekvence atoma u fosfatno-šećernim lancima idu u suprotnim pravcima i povezane su dijadom koja je pravomerna na osu spirale. Fosfatne i šećerne grupe nalaze se spolja u spirali, dok se baze nalaze unutar. Udaljenost atoma fosfora od ose vlakna iznosi 10 Å...”Slika 11.



Slika 11. Osnovna građa dijela jedne deoksiribonukleinske kiseline

Uopšteno govoreći, uloga vodoničnih veza u DNK je višestruka. Obično se pažnja usmerava na dva aspekta. Jedan od njih određuje takozvanu elektronsku komplementarnost. Na primer, u G·C paru, sparivanje se ostvaruje pomoću tri kanonske vodonične veze. Zbog toga je eksperimentalna entalpija (Entalpija, H: Toplotna energija koja se razmjenjuje između sistema i okoline pri konstantnom pritisku.) (10) formiranja G·C para u gasovitoj fazi, koja iznosi $-21,0 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ [68], jača od entalpije formiranja A·T para (slika12), koja je $-13,0 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ (11).

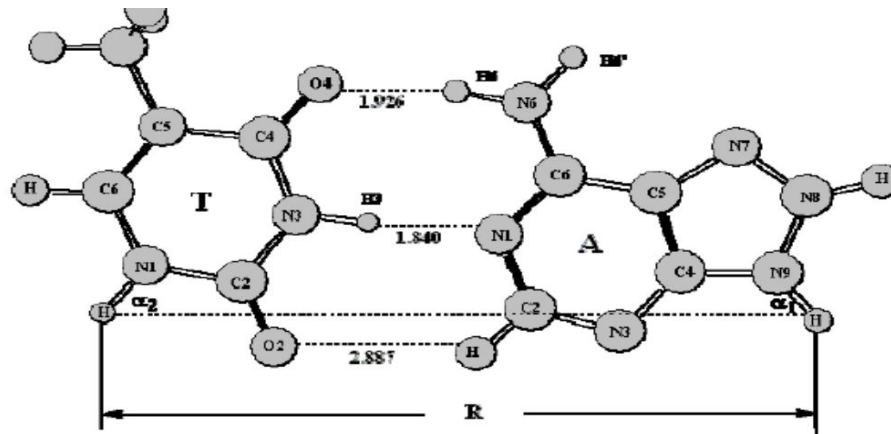
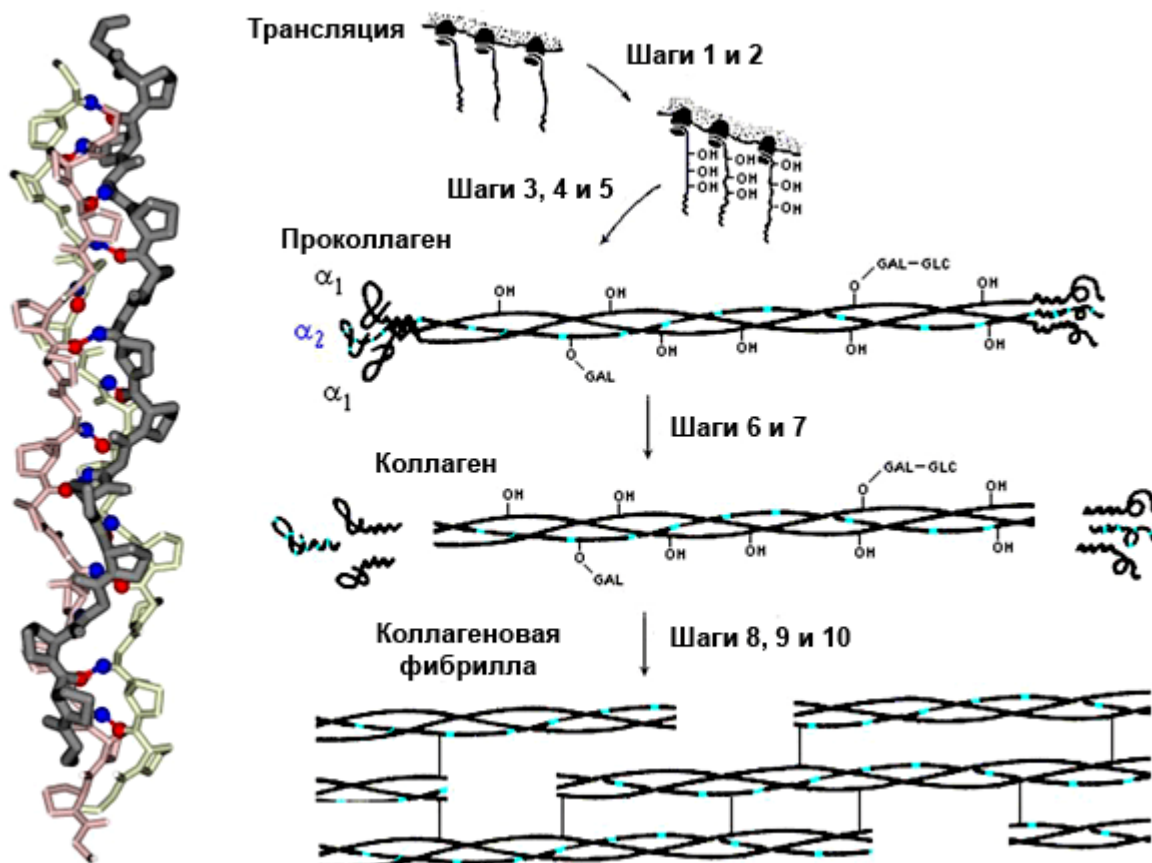


Рис. 3. Комплементарная пара [A·T]_{WC} ДНК, рассчитанная в настоящей работе методом B3LYP/6-311++G(d,p)

Slika 12. Komplementarni par [A·T]_{WC} DNK, izračunat u ovom radu metodom B3LYP/6-311++G(d,p).

3.2.3 Kollagen

“KOLAGEN (od grč. *kolla* – lepak i *-genes* – koji stvara, stvoren), fibrilarni protein koji čini osnovu vezivnog tkiva kod životinja (kože, ligamenata, tetiva, kostiju, hrskavica i dr.) i obezbeđuje mu čvrstinu. Stabilizacija molekula kolagena ostvaruje se zahvaljujući elektrostatičkim i hidrofobnim interakcijama, kao i vodoničnim i kovalentnim poprečnim vezama između alfa-lanaca. Vodonične veze formiraju se između karbonilne grupe i NH grupa peptidne veze ili OH grupe hidroksiprolina; moguće su i veze u kojima učestvuje voda (H₂O).” (13)



Slika 13. Model superspirale kolagena i njenog formiranja. Levo: model za sekvencu (glicin–prolin–prolin)_n. Svaki lanac je obeležen različitom bojom. Obeleženi su atomi vodonika koji formiraju vodonične veze iz NH-grupa glicina (plavom bojom) i atomi kiseonika iz CO-grupa prve prolinske jedinice u trojci Gly–Pro–Pro (crvenom bojom).

4. Zaključak

Vodonikove veze su široko prisutne u prirodi i imaju značajan uticaj na svojstva supstanci. Značajno podižu temperature topljenja i ključanja supstanci i utiču na njihovu rastvorljivost u vodi. Zahvaljujući formiranju vodonikove veze, voda, metanol, etanol, sirćetna kiselina i mnoge druge supstance nalaze se u tečnom stanju u uobičajenim uslovima.

Tako su reverzibilne molekularne interakcije u biološkim sistemima uslovljene nastankom vodoničnih veza, kao i elektrostatičkih i Van der Valsovih interakcija. Najveći uticaj na ove interakcije ima voda zahvaljujući svojim svojstvima kao što su polarnost, koheziona sila (sposobnost molekula vode da se međusobno povezuju) i sposobnost da stvara vodonične veze, i kao donor i kao akceptor vodonika.

Literatura

1 Hapala, Prokop; Kichin, Georgy; Wagner, Christian; Tautz, F. Stefan; Temirov, Ruslan; Jelínek, Pavel (19. 8. 2014). „Mechanism of high-resolution STM/AFM imaging with functionalized tips”. *Physical Review B*. **90** (8): 085421.

[Bibcode:2014PhRvB..90h5421H](#). [arXiv:1406.3562](#) .

[doi:10.1103/PhysRevB.90.085421](#).

2 Hämmäläinen, Sampsa K.; van der Heijden, Nadine; van der Lit, Joost; den Hartog, Stephan; Liljeroth, Peter; Swart, Ingmar (31. 10. 2014). „[Intermolecular Contrast in Atomic Force Microscopy Images without Intermolecular Bonds](#)”. *Physical Review Letters*. **113** (18): 186102. [Bibcode:2014PhRvL.113r6102H](#). [PMID 25396382](#).

[doi:10.1103/PhysRevLett.113.186102](#). Arhivirano iz [originala](#)

3 [Водородная связь | CHEMEGE.RU](#)

4 [Microsoft Word - FH2_19_Elektricna i magnetna svojstva molekula. Medjumolekulske sile_29.april 2020](#)

5 Dr. Predrag Đurđević, Dr. Miloš Đuran Opšta i neorganska hemija
Priridno-Matematički fakultet, Kragujevac 2002

6 P. Trpivać , Opšta hemija za studente medicine i stomatologiji ,Beograd-Zagreb 82

7 Hemija Opšta i neorganska, Stanimir R. Arsenjević 321

8 [Водородные связи в белке thiol:disulfide interchange protein DsbE](#)

9 Wilkins MHF, Stokes AR, Wilson HR. Molecular structure of nucleic acids: Molecular structure of deoxyribose nucleic acids. *Nature*. 1953;171:738–40.

<https://doi.org/10.1038/171738a0>

10 TERMOHEMIJA ENERGIJA I HEMIJA

11 Bulavin LA, Hovorun DM, Nikolaienko TYu. Structure of the monomers of DNA. Kyiv: Naukova Dumka; 2014. 205 p. <https://doi.org/10.13140/2.1.2257.1208> (in Russian)

12 [Вода | Строение молекулы, структура в жидком, твердом, газообразном виде](#)

13 [Антон Миндубаев | «Биомолекула»](#)