

**BC-1308 Biofísica** 

# Aula 2 Biofísica da água. Dispersões. Soluções e coloides Sol e gel.

Jiří Borecký CCNH 2014

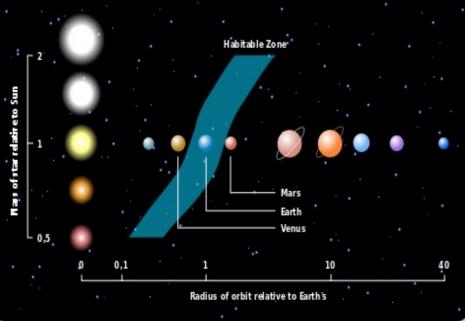


# Água

**BC-1308 Biofísica** 



- Água é essencial para vida nos planetas
- Zona de habilitabilidade permite presença de água em três estados



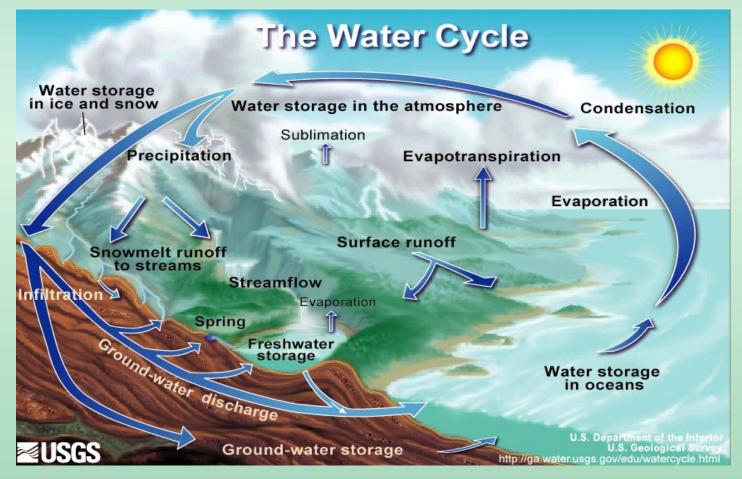


## Ciclo hidrológico

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

O ciclo hidrológico se refere a mudanças constantes da água entre hidrosfera, atmosfera, água subterrânea, superficial e das plantas

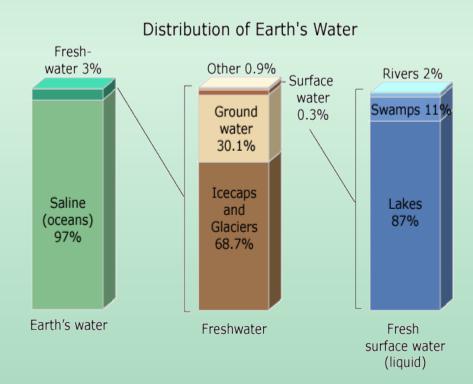




#### Recursos da água

**BC-1308 Biofísica** 

- Na Terra há cerca de 1 360 000 000 km³ de água que se distribuem da seguinte forma:
  - 1 320 000 000 km³ (97%) água do mar
  - 40 000 000 km³ (3%) água doce
  - 25 000 000 km³ (1,8%) gelo
  - 13 000 000 km³ (0,96%) água subterrânea
  - 250 000 km³ (0,02%) lagos e rios
  - 13 000 km³ (0,001%) vapor

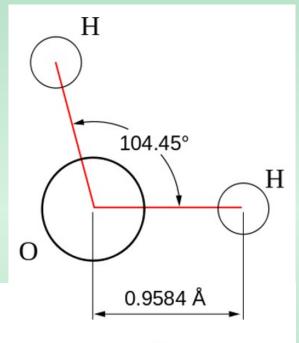


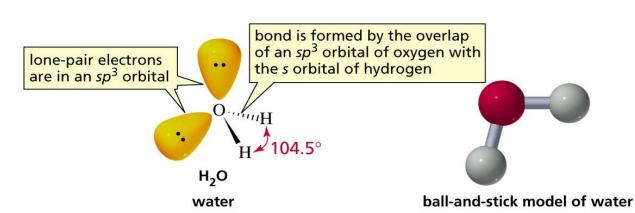


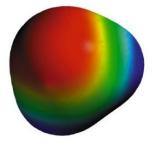
#### Estrutura da água

**BC-1308 Biofísica** 

- O oxigênio na água tem a configuração de orbital sp³:
  - 2 pares de e<sup>-</sup> + duas ligações de 2 e<sup>-</sup> com os hidrogênios
  - Esta conformação implica a forma angular da água





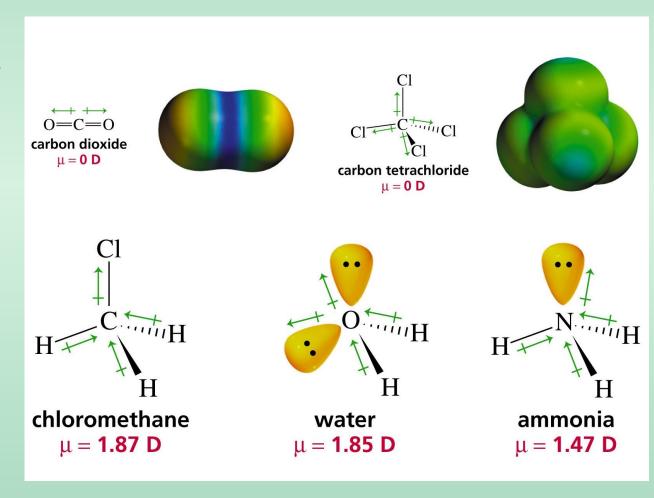


electrostatic potential map for water



**BC-1308 Biofísica** 

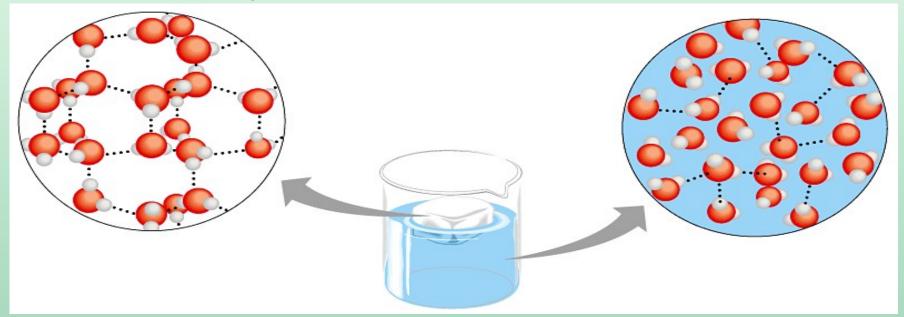
- A diferença de eletronegatividade entre os átomos O e H exerce força sobre a ligação entre eles
- A soma vetorial dessas forças resulta em formação de dipolo – molécula fica polarizada





## Ligações/pontes de hidrogênio

- Os estados físicos da água dependem da quantidade de pontes de hidrogênio
- Ponte de hidrogênio:
  - H é ligado covalentemente a um O (492,2148 kJ.mol<sup>-1</sup>), porém pode ser atraído por um outro O com energia de 23,3 kJ.mol<sup>-1</sup> (energia que é 5 vezes maior do que média das flutuações da colisão termal)



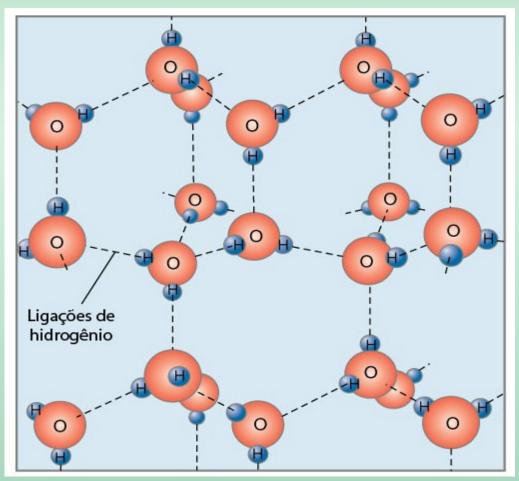


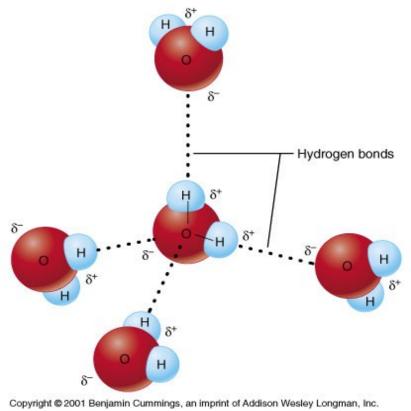
## Ligações/pontes de hidrogênio

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

Os estados físicos da água dependem da quantidade de ligações de hidrogênio



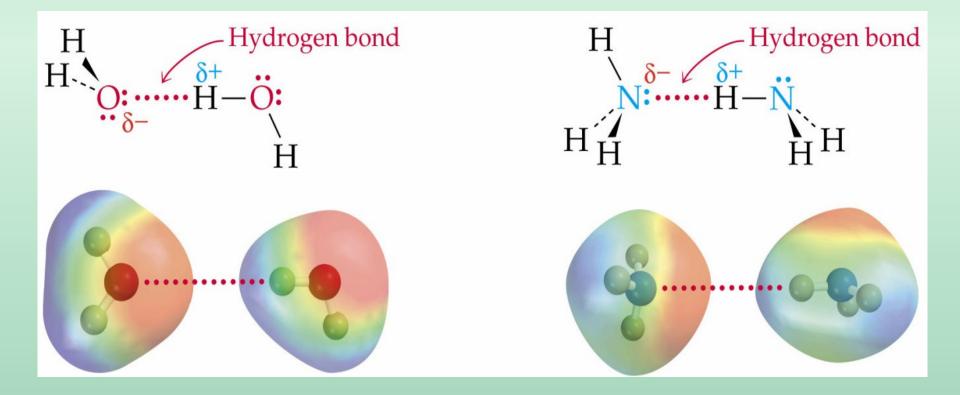




## Ligações/pontes de hidrogênio

**BC-1308 Biofísica** 

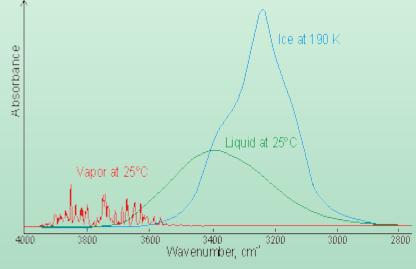
- Exemplo da importância das ligações de hidrogênio:
  - pareamento específico entre A-T e G-C (bases do DNA) garante a replicação correta da informação contida no DNA

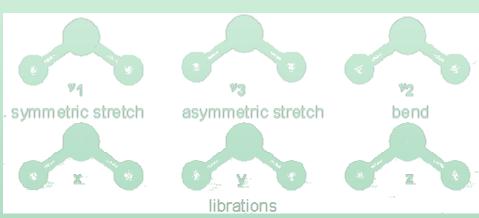




**BC-1308 Biofísica** 

- O espectro da absorção da água é muito complexo. A molécula da água pode vibrar em modos numerosos. No estado de gás, as vibrações envolvem combinações de estiramento simétrico (v1), assimétrico (v3) e flexão (v2) das ligações covalentes com intensidade da absorção (H<sub>2</sub>16O) v1;v2;v3 = 0.07;1.47;1.00.
- A molécula da água tem o momento de inércia na rotação muito pequeno o que causa no vapor espectros vibracional-rotacional bem combinados contendo 10⁵-10⁶ linhas da absorção. No liquido, as rotações tendem ser restritas pelos pontes de hidrogênio, resultando em librações. Também, espectrais são mais largas, por causa de superposição de muitos peaks da absorção





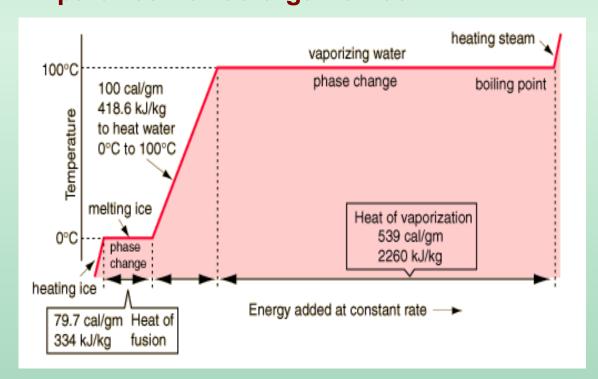


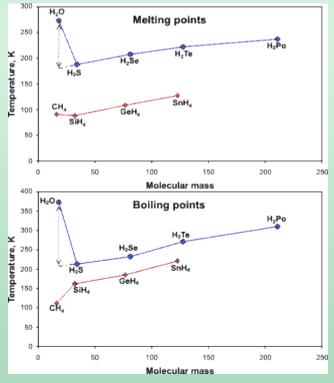
**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

- ➢ O calor específico molar da água é o mais alto (75,327 J.mol⁻¹K⁻¹) dos todos compostos conhecidos exceto amônia.
- Os pontos de fusão e ebulição da água são extremamente altos

Estes fatos levam a necessidade de evaporação de pouca água para resfriar os organismos!







**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

Anomalias da água – total				
<ul> <li>Anomalias fasimétricas</li> </ul>	12			
<ul> <li>Anomalias de densidade</li> </ul>	22			
<ul> <li>Anomalias de material</li> </ul>	13			
<ul> <li>Anomalias termodinâmicas</li> </ul>	11			
<ul> <li>Anomalias físicas</li> </ul>	9			

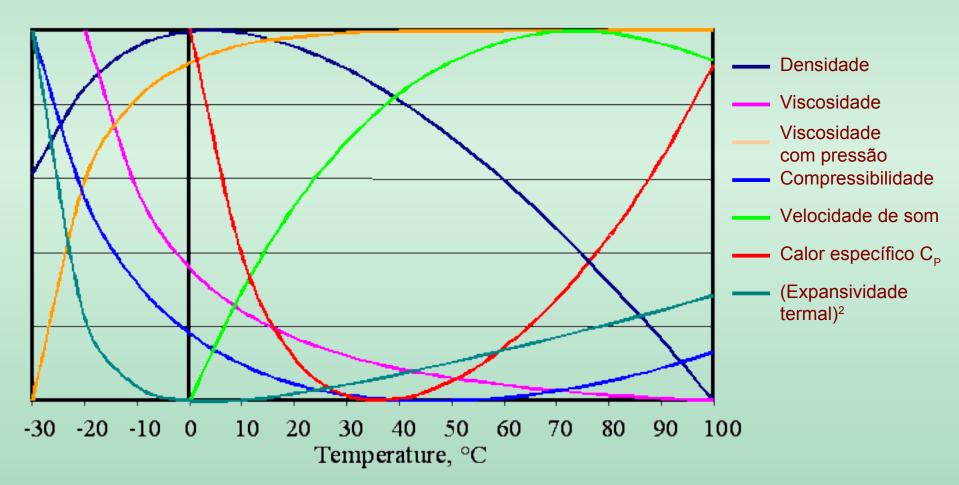
Site (em inglês) com maiores informações: http://www.lsbu.ac.uk/water/anmlies.html#P1



**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

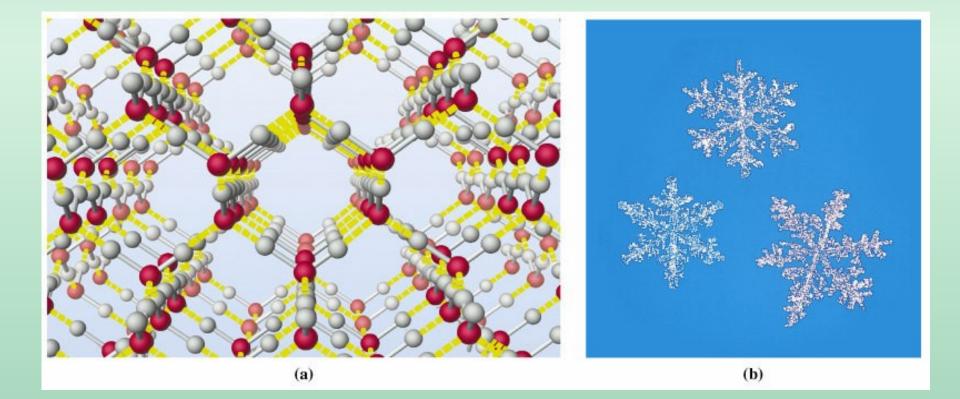
#### Exemplos de anomalias da água relacionados a temperatura:





Água, soluções e Dispersões

> A rede cristalina do gelo (H1) é organizada a partir das ligações de hidrogênio

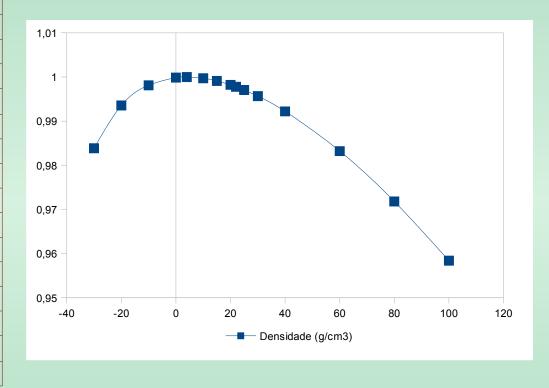




**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

Temperatura (°C)	Densidade (g/cm³)
100	0,958
80	0,972
60	0,983
40	0,992
30	0,996
25	0,997
22	0,998
20	0,998
15	0,999
10	1,000
4	1,000
0	1,000
-10	0,998
-20	0,994
-30	0,984

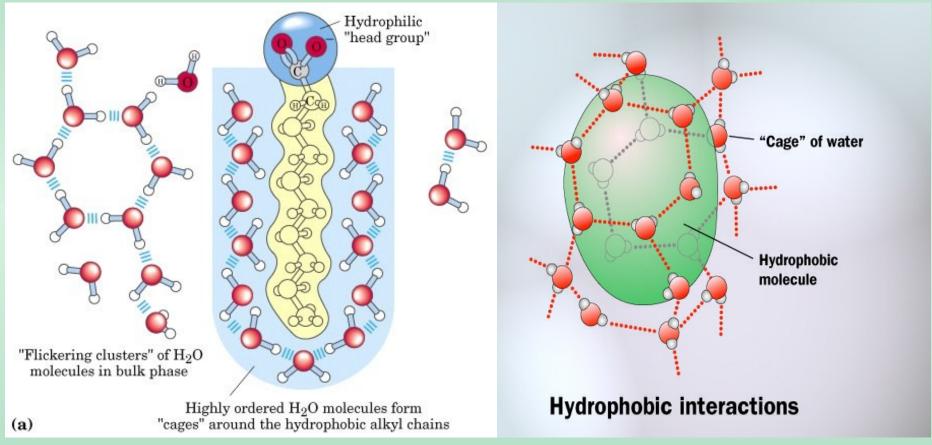


A densidade da água depende das ligações de hidrogênio. A água se expande ao congelar devido à elasticidade incomum das ligações de hidrogênio e à conformação cristalina particular de baixa energia que ela assume em condições normais de pressão. Isto é, ao resfriar-se, a água tenta organizar-se numa configuração de rede cristalina que alonga as componentes rotacionais e vibracionais das pontes, de forma que cada molécula de água é afastada das vizinhas. Isso efetivamente reduz a densidade ρ da água quando se forma gelo sob condições normais de pressão.



**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões



As moléculas hidrofóbicas forçam as moléculas da água se superorganizarem em volta delas, aumentando energia do sistema. Por isso, cada junção de moléculas hidrofóbicas libera algumas águas é energeticamente favorável – origem da interação hidrofóbica



#### Dispersão

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

#### Definição:

- Uma dispersão é uma mistura homogênea ou heterogênea de duas ou mais substâncias, em que as partículas de uma fase – a fase dispersa – se encontram distribuídas no seio da outra – a fase dispersante.
- > Tipos (diferem na dimensão média das partículas constituintes):
  - Suspensões (mistura heterogênea):
    - partículas dispersas têm mais de 100 nm de diâmetro
    - partículas usualmente visíveis a olho nu
    - separação do disperso do dispersante pela decantação ou filtração
  - Soluções coloidais (mistura heterogênea):
    - partículas dispersas têm entre 1 nm e 100 nm de diâmetro
    - Partículas invisíveis a olho nu, mas visíveis com microscopia
    - separação do disperso do dispersante pela centrifugação
  - Soluções verdadeiras (mistura homogênea):
    - partículas dispersas têm até 1 nm de diâmetro
    - partículas dissolvidas invisíveis com microscopia eletrônica
    - separação do disperso do dispersante pela destilação, cristalização, etc.



## Suspensão

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

#### ➤ Características:

- as partículas tendem a se depositar sedimentar em função da força da gravidade exercida sobre elas
- A velocidade de sedimentação depende:
  - do tamanho da partícula do disperso
  - da viscosidade do dispersante

$$\lambda \frac{\partial n}{\partial x} + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial n}{\partial t}$$

Onde n é a concentração de partículas de soluto em um ponto x do meio, no instante t determinado, D é o coeficiente de difusão, e  $\lambda$  é denominado velocidade de arraste.



## Suspensão

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

#### Características:

- Partículas
  - as dimensões, a forma e a flexibilidade das partículas
  - Força gravitacional
  - Conjuntos ou aglomerados heterogênicos de compostos
- Interações entre partículas
  - Exclusão do volume (Repulsão)
  - Interação eletrostática (Repulsão/Atração)
  - Forças van der Waals dipolos (Repulsão/Atração)
  - Forças entropicas (Atração)
  - Forças estéricas (Repulsão)
- interações partícula-solvente
  - forças de hidratação, solvatação



#### Colóides

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

# ➤ Tipos:

	Disperso			
		Gás	Líquido	Sólido
Dispersante	Gás		Aerosol líquido, (nuvem, neblina)	Aerosol sólido, (fumaça, pó em suspensão)
	Líquido	Espuma líquida (chantilly, espuma de sabão)	Emulsão (leite, maionese, cremes, sangue, shampoo)	Sol (tintas, vidros coloridos)
	Sólido	Espuma sólida (pedra-pomes)	Gel (gelatina, queijo, geléia)	Sol sólido (cristais de rubi e safira, ligas metálicas)



#### Coloide

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

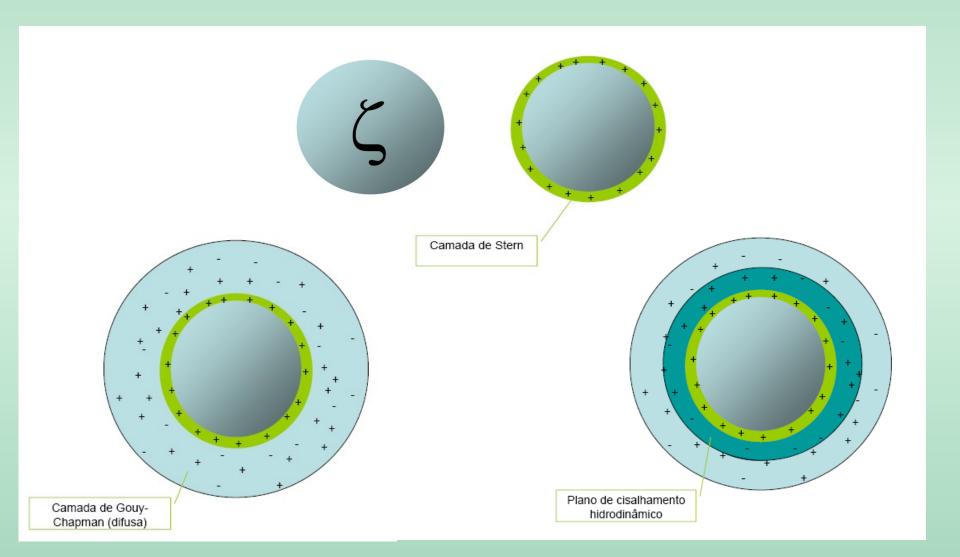
#### Características:

- Partículas
  - as dimensões, a forma e a flexibilidade das partículas
  - Força gravitacional
  - Aglomerados de átomos, moléculas ou íons, micelas
- Interações entre partículas
  - Exclusão do volume (Repulsão)
  - Interação eletrostática (Repulsão/Atração)
  - Forças van der Waals dipolos (Repulsão/Atração)
  - Forças entropicas (Atração)
  - Forças estéricas (Repulsão)
- interações partícula-solvente
  - forças de hidratação, solvatação



#### Potencial zeta

**BC-1308 Biofísica** 

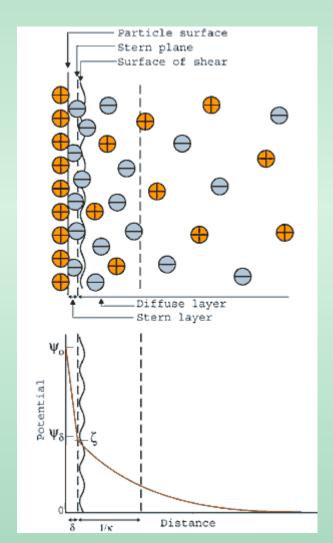




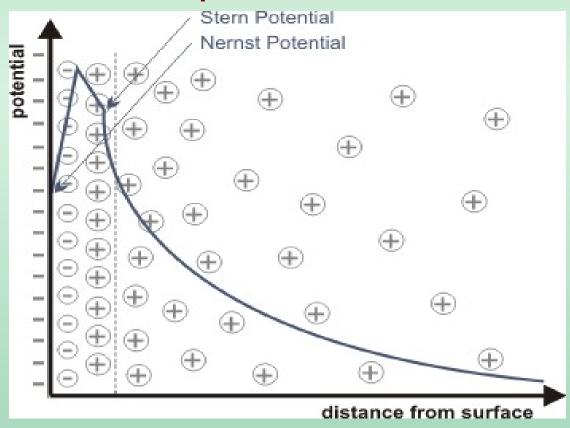
#### Potencial zeta

Água, soluções e Dispersões

**BC-1308 Biofísica** 



$$U = \frac{\zeta \varepsilon}{4\pi \eta}$$





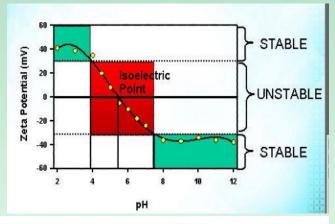
#### Potencial zeta

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

#### Fatores que afetam o potencial zeta:

- Mudanças no pH da solução
- Concentração salina (força iônica)
- Concentração de um aditivo (ex.: surfactante, polímero...)



Partículas com potencial zeta grande: Repelem-se e a dispersão é estável!









Stability Average Zeta Potential (In millivolts)

Stability of Solution-Zeta Potential from "A Control of Colloidal Stability" by Thomas Riddick

Extreme to very good stability

Reasonable stability

-00 to -60 mv

-60 to -40 mv

Moderate stability

-40 to -30 mv

Threshold of light dispersion

-30 to -15 mv

Threshold of agglomeration

-5 to +5 mv

#### Limite de estabilidade em água: Potencial zeta > |30mV|





# Soluções

Água, soluções e Dispersões

**BC-1308 Biofísica** 

# ➤ Tipos:

		Disperso			
		Gás	Líquido	Sólido	
Dispersante	Gás	Oxigênio em nitrogênio	Vapor em ar	Naftaleno sublime em ar	
	Líquid o	Oxigênio ou CO <sub>2</sub> na água	Álcool em água Vitamina A em óleo	NaCl, sacarose em água	
	Sólido	Hidrogênio em platina ou paládio	Hexano em parafina, Mercúrio em ouro	Aço (C em Fe),	



## Soluções

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

#### Características:

- Partículas
  - as dimensões, a forma e a flexibilidade das partículas
  - Força gravitacional
  - Átomos, moléculas ou íons
- Interações entre partículas
  - Exclusão do volume (Repulsão)
  - Interação eletrostática (Repulsão/Atração)
  - Forças van der Waals dipolos (Repulsão/Atração)
  - Forças entropicas (Atração)
  - Forças estéricas (Repulsão)
- interações partícula-solvente
  - forças de hidratação, solvatação



# Soluções

**BC-1308 Biofísica** 

Água, soluções e Dispersões

#### ➤ Características:

- Solubilidade
  - Produto de solubilidade

$$A_a B_b$$
 (s)  $A_b = A^{b+}(aq) + b B^{a-}(aq)$   
 $K_s = [A^{b+}]^a . [B^{a-}]^b$ 

Mudança de ponto de ebulição

$$PE_{total} = PE_{solvente} + \Delta T_b \qquad \Delta T_b = K_b.\overline{m}.i$$

Mudança de ponto de fusão

$$PF_{total} = PF_{solvente} - \Delta T_f \qquad \Delta T_f = K_f \cdot \overline{m} \cdot i$$

Molalidade:  $\overline{m} = n/m$  | fator de Van't Hoff:  $i = 1 + \alpha(q - 1)$ 

K<sub>b</sub> e K<sub>f</sub> – constantes de ebulição e fusão (respetivamente)