

Estructura del Agua

Agosto de 2007

Introducción

El agua es el compuesto más abundante en la biosfera y en los seres vivos, ello su estudio es muy importante en Bioquímica. Además, para ser un compuesto de peso molecular bajo, sus propiedades fisicoquímicas constituyen un conjunto único. En esta sesión, emplearemos la visualización molecular para tratar de explicar el origen de algunas de las propiedades más interesantes del agua.

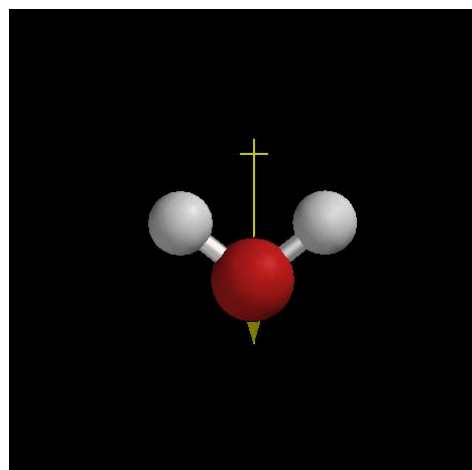
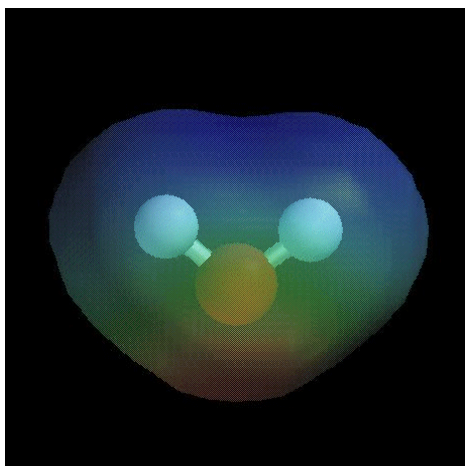
Antes de iniciar el ejercicio debes descargar el archivo Moléculas02.zip y desempaquetarlo, como hiciste en la sesión anterior. Al desempaquetar debe crearse la carpeta **Moléculas02**, que contiene los archivos de trabajo para esta práctica. También es conveniente que te asegures que el programa **RasMol** esté disponible. Si no es así, vuelve a instalarlo como lo hiciste la sesión pasada. Para guardar los archivos que generes durante el desarrollo del tema, crea una carpeta de trabajo que tenga por nombre tus apellidos y Agua (ejemplo: **Sosa Torres Agua**) en **Mis documentos**.

La molécula de Agua

Abre el archivo **H2O.pdb**, que se encuentra en la carpeta **Moléculas** que acabas de desempaquetar. Este archivo contiene las coordenadas atómicas de una molécula de agua, calculadas a partir del espectro de resonancia magnética nuclear. Visualiza la molécula en modo **Ball & Stick** y marca los átomos escribiendo en la línea de comandos:

```
label %e%i
```

Con **set picking distance**, mide las distancias O1 – H2 y O1 – H3. El valor teórico para la distancia del enlace H-O es de 1 Å con variación en el rango de 0.85 y 1.12 Å. Utiliza el comando **set picking angle**, para medir el ángulo de enlace H2 – O1 – H3. El valor teórico es alrededor de 105°, pero experimentalmente varía en un rango de 102° a 109°. Este ángulo de enlace genera asimetría en la distribución de carga en la molécula, como se muestra del lado izquierdo de la figura siguiente.



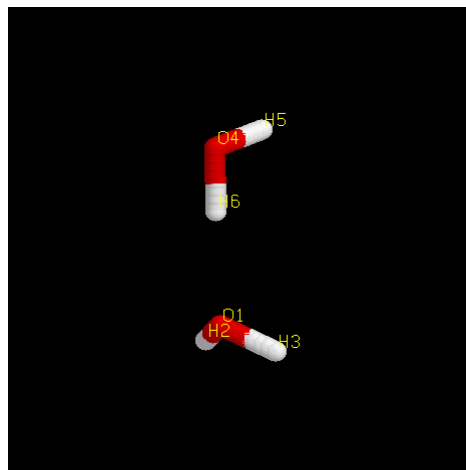
El extremo inferior de la figura, de color rojo, tiene alta densidad de electrones y carga parcial negativa. El extremo superior, deficiente en electrones, tiene carga positiva. Esta

distribución de cargas determina la magnitud del momento dipolo de la molécula de agua, el cual se representa como una flecha del lado derecho de la figura anterior. Como ya estudiaste en teoría, el momento dipolo de la molécula de agua es responsable de que a temperatura ambiente este compuesto se encuentre en estado líquido.

En otra ventana de **RasMol**, abre el archivo **CO2.pdb**, que contiene las coordenadas atómicas modeladas para una molécula de Bióxido de carbono. Mide el ángulo de enlace O – C – O. Este compuesto tiene un peso molecular casi tres veces mayor que el agua, y al igual que ella está formado por enlaces covalentes polares, sin embargo, a temperatura ambiente es un gas.

El puente de Hidrógeno

La polaridad de las moléculas de agua, provoca la asociación entre ellas. La asociación entre moléculas de agua explica muchas de sus propiedades. Las interacciones que mantienen asociadas las moléculas de agua se denominan **puentes de Hidrógeno**. Abre el archivo **2H2O.pdb**. Visualiza las moléculas en formato **Sticks**, y marca los átomos con el mismo tipo de etiquetas que la molécula de agua. El resultado debe ser semejante a la figura de la derecha. Observa que el enlace O4-H6 de la molécula superior apunta al átomo de Oxígeno O1 de la inferior. Esta alineación es la forma característica del puente de Hidrógeno. Mide la distancia entre el Hidrógeno H6 y el Oxígeno O1, que forman el enlace. El valor teórico del puente es de 1.82 Å pero puede variar entre 1.75 y 2.0 Å. Ahora mide la distancia O4 – O1. El rango de valores observados es entre 2.65 y 3.1 Å.



Cambia el modo de visualización a **Spacefill**, observa que la distancia entre Hidrógeno y Oxígeno no enlazados es menor que la suma de los radios de van der Waals de los átomos, pero mayor que la distancia del enlace que mediste para los enlaces H-O en la molécula de agua.

Escribe en la línea de comandos:

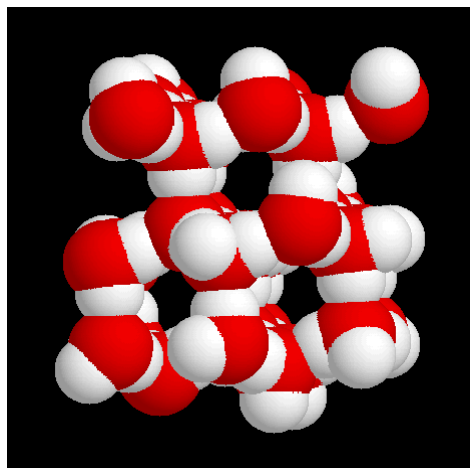
set picking torsion

Haz *clic* en el átomo H3, después en O1, luego en O4 y finalmente en H5. En la ventana de la línea de comandos debe aparecer el nombre de cada átomo seleccionado, y después de seleccionar el último, el valor del ángulo de torsión en grados (-64.5°). Mide el otro ángulo de torsión del dímero (H2-O1-O4-H5) el valor debe ser semejante, pero de signo contrario. Estos ángulos son variables porque depende de la temperatura a la que se encuentra el agua.

Estructura del agua

La organización estructural de las moléculas de agua en estado sólido y líquido, depende de la formación de puentes de Hidrógeno. Abre el archivo **Ice.pdb** que se encuentra en la misma carpeta que las moléculas anteriores. Este archivo contiene las coordena-

das atómicas de un cristal de hielo. Observa la disposición regular de las moléculas, este ordenamiento es mantenido por puentes de Hidrógeno.



Cambia al modo de visualización **Spacefill**, observa que la separación entre las moléculas es grande y aún son visibles huecos entre ellas. La imagen debe ser semejante a la figura de la izquierda. Cambia el modo de visualización a **Wireframe** y realiza las maniobras que se describen a continuación.

Selecciona los átomos de Oxígeno escribiendo en la línea de comandos:

```
select Oxygen
```

Hazlos visibles cambiando el despliegue a **Ball & Sticks**. Escribe en la línea de comandos

```
label %r
```

Cambia el color de las etiquetas a amarillo. Selecciona la molécula central con el comando:

```
select 1
```

Cambia el color de este átomo a blanco (**color white**). Ahora, escribe en la línea de comandos:

```
restrict within(3.0,1)
```

Con esta instrucción se visualizan únicamente los átomos de Oxígeno que se encuentran dentro de un radio menor o igual a 3.0 Å de la molécula seleccionada. Cuenta el número de átomo visibles alrededor del átomo marcado. Guarda la imagen generada, en tu carpeta de trabajo, con formato **GIF** y nombre **Sólido**.

Cierra el archivo activo y abre **Liquid.pdb** que está en la carpeta **Moléculas02**. Este archivo contiene las coordenadas atómicas de un modelo del agua líquida obtenido a partir de cálculos teóricos. Como puedes ver, no existe ningún orden, cambia la visualización a **Spacefill**, casi no hay espacio entre las moléculas, la imagen debe ser semejante a la de la figura de la derecha. Cambia la visualización a **Wireframe**.

Selecciona los átomos de Oxígeno escribiendo en la línea de comandos:

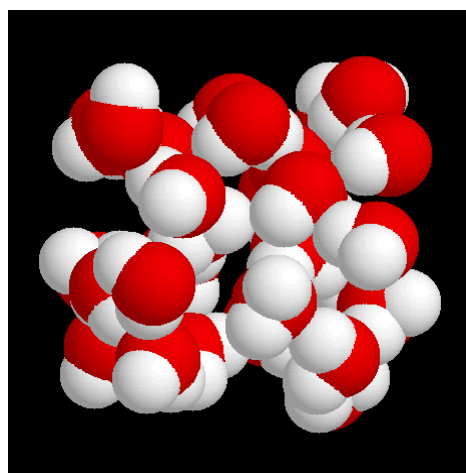
```
select Oxygen
```

Cambiando la visualización a **Ball & Sticks**. Escribe en la línea de comandos

```
label %r
```

Cambia el color de las etiquetas a amarillo. Selecciona la molécula 17 con el comando:

```
select 17
```



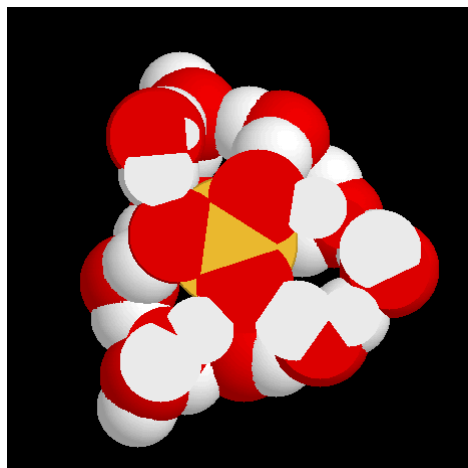
Cambia el color de este átomo a azul (**color blue**). Ahora, escribe en la línea de comandos:

```
restrict within(3.0,17)
```

Cuenta el número de átomo visibles alrededor del átomo marcado. Como puedes ver, hay más moléculas en el mismo volumen en el líquido que en el sólido, como corresponde a la mayor densidad del agua líquida. Guarda la imagen generada, en la carpeta de trabajo que creaste en **Mis documentos**, con formato **GIF** y nombre **Líquido**. Cierra la molécula actual.

El agua como solvente

Las propiedades del agua como solvente se basan en su capacidad para interactuar con muchos tipos de sustancias como veremos a continuación.



Solutos iónicos. Abre el archivo **SO4.pdb** de la carpeta **Moléculas02**, este archivo contiene las coordenadas de un ión Sulfato (SO_4^{2-}) hidratado. Cambia la visualización a **Spacefill**. Activa la opción **Slab Mode** del menú **Options**, rota la imagen para que puedas ver como los átomos de Hidrógeno del agua, que tienen carga parcial positiva, hacen contacto con los Oxígenos del sulfato con carga negativa. La imagen debe ser semejante a la figura de la izquierda. Cambia la visualización a **Ball & Sticks**. Usando los comandos que estamos practicando en esta sesión, determina el número de moléculas de agua que están en contacto directo con el Sulfato, tomando como referencia

el átomo de Azufre (sulfur); este es el número de hidratación del ión. Si a la distancia que usaste en el agua, no aparecen átomos, aumenta la distancia en intervalos de 0.1 Å, hasta que aparezcan los primeros. Guarda la imagen generada, en la carpeta de trabajo que creaste en **Mis documentos**, con formato **GIF** y nombre **Sulfato**. Cierra la molécula actual.

Solutos polares. Cierra el archivo anterior y abre el archivo **Inositol.pdb** que está en la misma carpeta. Este archivo contiene las coordenadas de una molécula de Inositol hidratado, cambia la visualización a **Ball & Sticks**. Haz un acercamiento para que puedas observar la forma en que los enlace O-H del agua y del Inositol se alinean para formar puentes de Hidrógeno, como puedes ver no es necesaria una alineación perfecta. Cambia la visualización a **Spacefill**. En RasMol, es posible seleccionar grupos de átomos de una molécula. En la línea de comandos escribe:

```
select *1.c
```

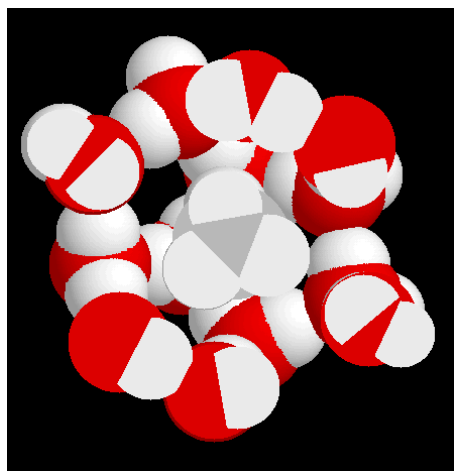
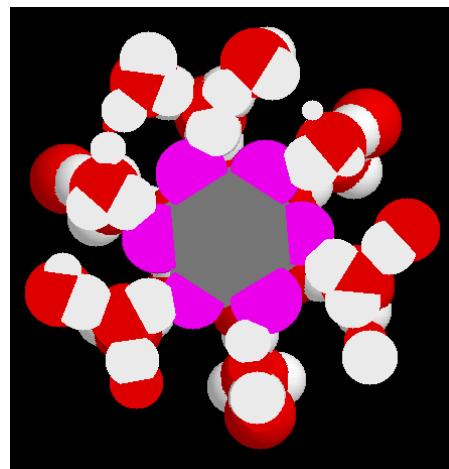
Se seleccionan todos los átomos de carbono de la molécula 1, que es el Inositol. Cambia el color a gris con el comando:

```
color [128,128,128]
```

Ahora, selecciona los átomos de Hidrógeno unidos a ellos escribiendo en la línea de comandos:

```
select *1.hc
```

Coloréalos del mismo gris. Selecciona los átomos de Oxígeno del Inositol (*1.o), coloréalos de magenta, selecciona los Hidrógenos unidos a ellos (*1.ho) y coloréalos de azul. Utiliza el modo **Slab** para observar que los contactos entre los átomos de Hidrógeno y Oxígeno del agua y el Inositol. La imagen debe ser semejante a la figura de la derecha. Usando los comandos que ya aprendiste, cuenta las moléculas de agua que hacen puente de Hidrógeno con los átomos de Oxígeno del Inositol.



Sustancias no polares. Abre el archivo **Metano.pdb** que está

en la misma carpeta que las anteriores. Este archivo contiene las coordenadas de una molécula de metano encerrada en un clatrato de 20 moléculas de agua, modelado a partir de datos de resonancia magnética nuclear. Cambia el modo de visualización a **Sticks** para que puedas comprobar que todos los enlaces H-O están ocupados en puentes de Hidrógeno o dirigidos hacia afuera del clatrato, donde no interactúan con el metano. Cambia la visualización a **Spacefill** y activa el modo **Slab**. Gira la molécula sobre X y Y para que puedas comprobar que no hay ningún contacto entre

las moléculas de agua y el metano. La imagen debe ser semejante a la figura de la izquierda.

Como puedes imaginar, una estructura tan organizada como esta no se forma espontáneamente, requiere de energía para vencer la disminución de entropía del agua, esa es la razón por la cual los compuestos no polares, no se disuelven en agua. Cierra el archivo activo.

Sustancias anfipáticas. Abre el archivo **Anfi.pdb**, que contiene una parte de las coordenadas del modelo de una micela formada por moléculas del lípido lecitina. En la línea de comandos escribe:

```
select nitrogen
```

Cambia el **Display** a **Spacefill**. Observa que las moléculas de agua se alejan de las cadenas de carbono de la lecitina, interactuando con el Nitrógeno positivo de la colina y los átomos de Oxígeno de los ésteres.

Ahora abre el documento **Agua.doc** que está en la carpeta **Moléculas02**, y resuelve el cuestionario. Cuando termines, guárdalo en tu carpeta de trabajo, con tus imágenes, sin cambiar el nombre. Comprime la carpeta y envía el archivo comprimido adjunto a un mensaje de correo electrónico dirigido a:

bioquimica_esm@yahoo.com.mx

El mensaje debe tener como asunto *Agua*, y en el cuerpo del mensaje debes escribir tu nombre, grupo y la descripción de lo que estas enviando.