2장 물과 pH

- 물의 성질
- 수소 결합
- 산, 염기, pH 정의와 계산
- 완충액

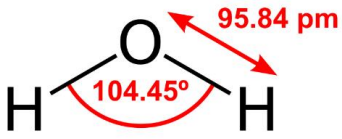
생의학적 중요성

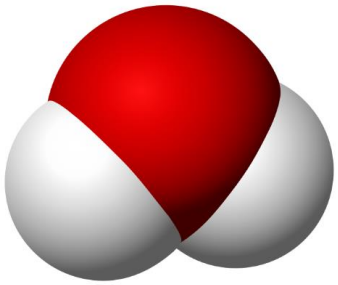
- 물은 생명체에 가장 많이 존재하는 화학 성분
- 많은 유기물과 무기물을 용해시키는 용매
- 쌍극성 구조와 수소결합

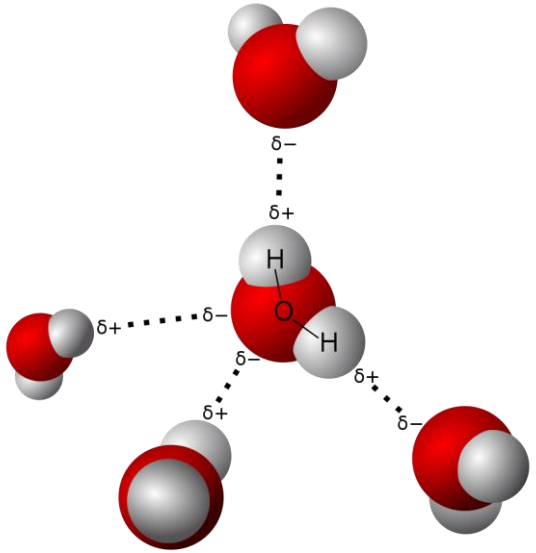
- 물은 체내 많은 대사반응에서 반응물 또는 생성물
- 항이뇨호르몬(antidiuretic hormone, ADH), 신장에서 조절

- 탄산수소염 완충액에 의해 약 염기로(pH: 7.35-5.45) 조절됨

물의 이상적인 생물학적 용매이다





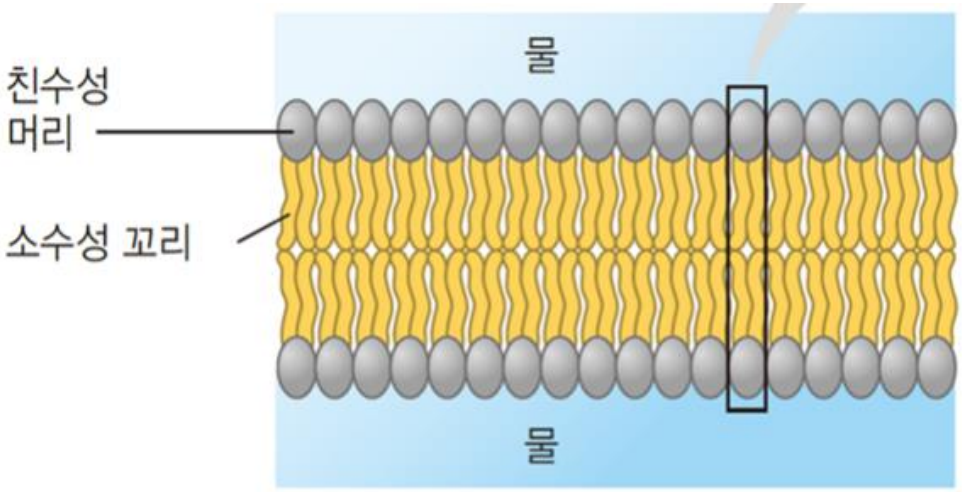


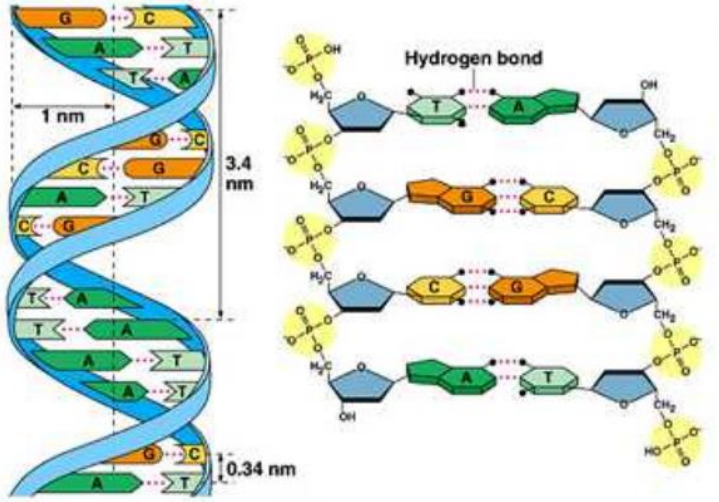
극성 분자 (쌍극자 모멘트를 가진다)	수소결합
- 극성 용매와 잘 섞인다 - 전하를 띄는 화합물을 잘 녹인다 (ex: 이온결합 물질)	- 녹는점과 끓는점 높다 - 표면장력이 크다 - 비열이 크다

생체분자의 구조는 물과의 상호작용에 의해 영향을 받는다

- 공유결합과 비공유결합은 생체분자를 안정화 시킴
- 인력 또는 반발력으로 분자와 환경과 상호작용

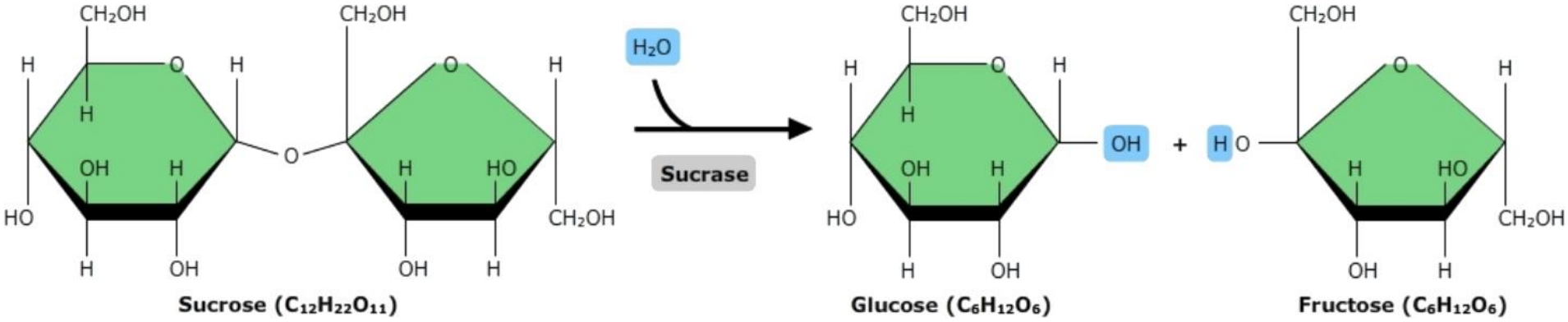
- 양친매성: 소수성(비극성)과 친수성(극성)의 성질을 동시에 가지고 있는 분자
- 생체분자에서 극성 부위는 세포 표면에 위치



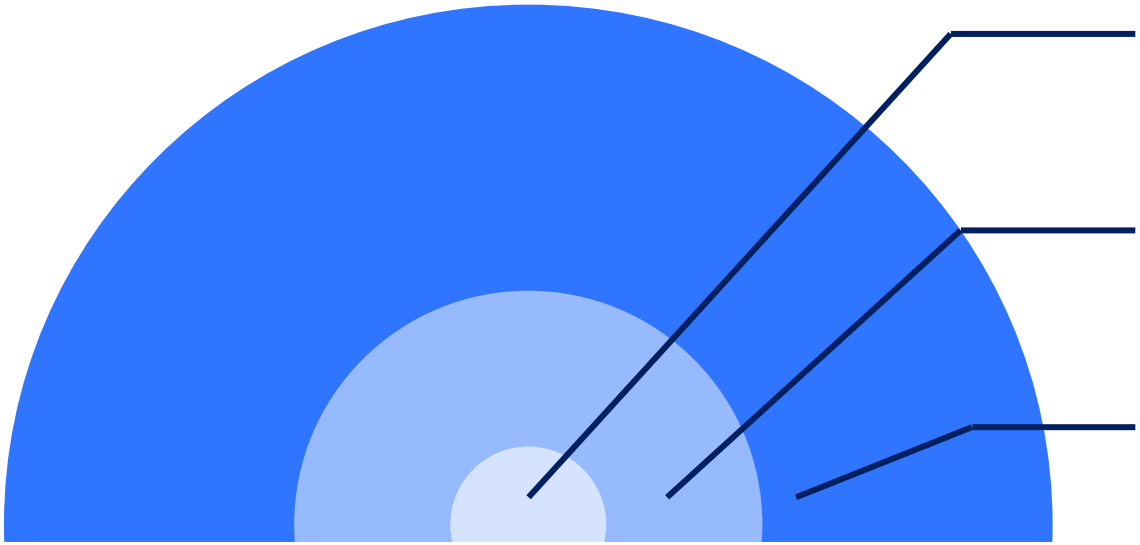


가수분해 반응

- 가수분해(hydrolysis): 물과 반응하여 원래 하나였던 큰 분자가 몇 개의 이온이나 분자로 분해되는 반응 ↔ 탈수축합
- 소화반응은 대표적인 가수분해 반응
- 예) 설탕(이당류) → 포도당(단당류)



산과 염기의 정의



아레니우스 산/염기
수용액에서만 적용 가능

브뢴스테드-로우리 산 염기
짝산/짝염기 개념

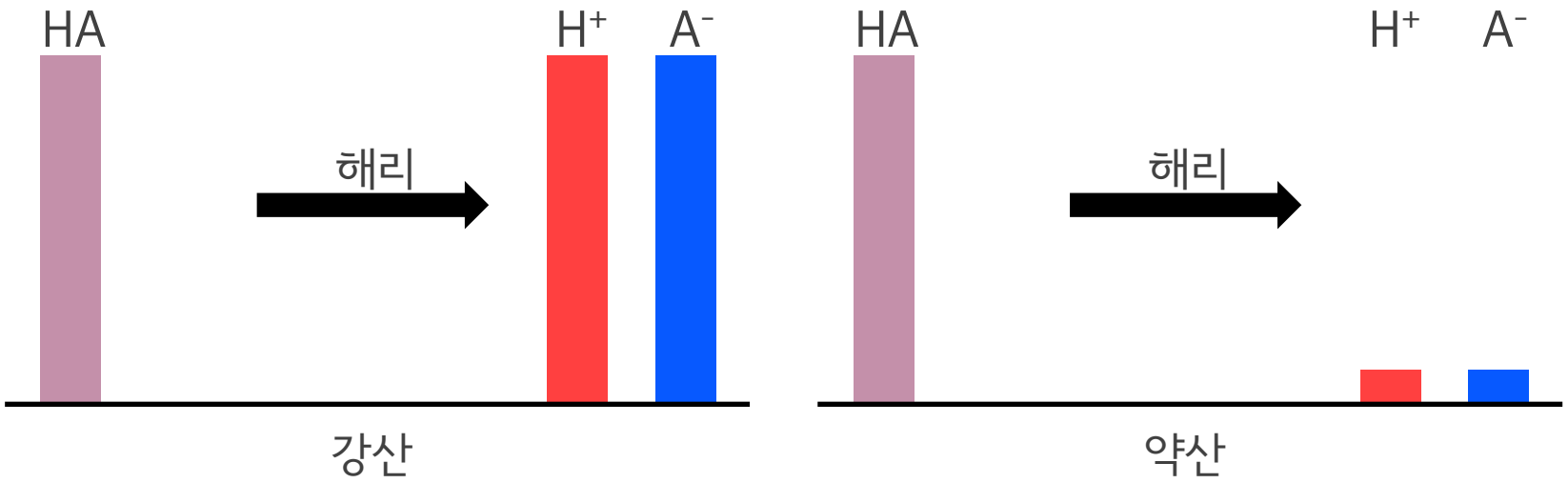
루이스 산/염기
화학 반응 전체에 적용 가능

	아레니우스 정의 Arrhenius definition	브뢴스테드-로우리 정의 Brønsted-Lowry definition	루이스 정의 Lewis definition
산	물에 용해되어 H^+를 내놓는 물질	화학 반응에서 H^+를 주는 물질 (양성자 주개)	화학 반응에서 전자쌍을 받는 물질 (전자쌍 받개)
염기	물에 용해되어 OH^-를 내놓는 물질	화학 반응에서 H^+를 받는 물질 (양성자 받개)	화학 반응에서 전자쌍을 주는 물질 (전자쌍 주개)

산과 염기의 세기

$$HA(aq) + H_2O(l) \leftrightarrows H_3O^+(aq) + A^-(aq)$$

- 강산(Strong Acid): 산이 거의 모두 이온화되어 있는 산
- 약산(Weak Acid): 극히 적은 양만 이온화되는 산



- 강염기(Strong acid), 약염기(weak base)
- 강산의 짝염기는 약염기, 약산의 짝염기는 강염기

산과 염기의 세기

산 해리 상수 (Acid Dissociation constant, Ka)

$$HA(aq) + H_2O(l) \leftrightarrows H_3O^+(aq) + A^-(aq)$$

$$K_a = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA]} = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

- K_a가 크면 산이 많이 해리되었다는 것을 의미 = 더 강한 산
- 산이 강할수록 pKa는 작아짐
- 염기는 짝산의 pKa를 사용

물분자는 미미하지만 중요한 해리 경향이 있다

순수 물은 하이드로늄 이온(H_3O^+)과 수산화이온 (OH^-)으로 해리된다.

$$H_2O + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + OH^-$$

$$H_2O \leftrightarrow H^+ + OH^-$$

물의 해리를 해리상수 K를 사용해서 표현하면 다음과 같다.

$$K = \frac{[H^+][OH^-]}{[H_2O]}$$

수소이온, 수산화이온, 물의 몰 농도를 대입해서 K를 구한다.

$$K = \frac{[H^+][OH^-]}{[H_2O]} = \frac{[10^{-7}][10^{-7}]}{[55.56]}$$

$$= 0.018 \times 10^{-14} = 1.8 \times 10^{-16} \text{mol/L}$$

물분자는 미미하지만 중요한 해리 경향이 있다

순수 물의 몰 농도(55.56)는
해리되는 양(10^{-7})에 비해 너무 커서
일정한 것으로 인정한다. (=상수 취급)

$$K = \frac{[H^+][OH^-]}{[H_2O]} = 1.8 \times 10^{-16}\,mol/L$$

물의 해리상수 K는
물의 이온곱 상수 K_w로 표현

$$\begin{aligned} K_w &= (K)[H_2O] = [H^+][OH^-] \\ &= (1.8 \times 10^{-16}\,mol/L)(55.56\,mol/L) \\ &= 1.00 \times 10^{-14}\,(mol/L)^2 \end{aligned}$$

K_w는 수치적으로
H^+와 OH^-의 몰 농도를 곱한 값과 같다.

$$K_w = [H^+][OH^-]$$

물분자는 미미하지만 중요한 해리 경향이 있다

T (°C)	K_w	pK_w	neutral pH
0	0.114×10^{-14}	14.94	7.47
5	0.186×10^{-14}	14.73	7.37
10	0.293×10^{-14}	14.53	7.27
15	0.457×10^{-14}	14.34	7.17
20	0.681×10^{-14}	14.17	7.08
25	1.008×10^{-14}	14.00	7.00
30	1.471×10^{-14}	13.83	6.92
35	2.089×10^{-14}	13.68	6.84
40	2.916×10^{-14}	13.54	6.77
45	4.074×10^{-14}	13.39	6.70
50	5.476×10^{-14}	13.26	6.63

T (°C)	K_w	pK_w	neutral pH
55	7.244×10^{-14}	13.14	6.57
60	9.550×10^{-14}	13.02	6.51
65	12.58×10^{-14}	12.90	6.45
70	15.85×10^{-14}	12.80	6.40
75	20.42×10^{-14}	12.69	6.35
80	25.12×10^{-14}	12.60	6.30
85	30.90×10^{-14}	12.51	6.26
90	38.02×10^{-14}	12.42	6.21
95	45.71×10^{-14}	12.34	6.17
100	51.3×10^{-14}	12.29	6.14

pH는 수소 이온 농도에 대한 대수의 음의 값이다

pH: 수소 이온이 얼마 있는지 알 수 있게 하는 척도

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

연습문제) 25℃에서 순수 물의 pH를 구하시오.

25℃에서의 H^+의 몰 농도 = 1.00×10^{-7}

$pH = -\log [H^+] = -\log 10^{-7} = -(-7) = 7.0$

예제 1) 수소 이온 농도가 3.2×10^{-4} 몰/L인 용액의 pH는?

$pH = -\log [H^+] = -\log (3.2 \times 10^{-4}) = 3.5$

pH는 수소 이온 농도에 대한 대수의 음의 값이다

이온곱상수 정의에 의해서 $K_w = [H^+][OH^-] = 10^{-14}$

양변에 log를 취하면 $\log[H^+] + \log[OH^-] = \log 10^{-14}$

p 를 이용하여 표현하면 $pH + pOH = 14$

예제 2) 수산화 이온 농도가 4.0×10^{-4} 몰/L인 용액의 pH는?

$$[OH^-] = 4.0 \times 10^{-4}$$

$$pOH = -\log[OH^-]$$

$$= -\log(4.0 \times 10^{-4})$$

$$= -\log(4.0) - \log(10^{-4})$$

$$= -0.60 + 4.0$$

$$= 3.4$$

$$pH = 14 - pOH = 14 - 3.4$$

$$= 10.6$$

약산 작용기는 생리학적으로 아주 중요하다

완충(buffer): pH의 갑작스러운 변화에 저항하는 힘

- [산] = [짝염기] 혹은 [염기] = [짝산] 일 때 효과적

- 생물은 pH의 변화에 매우 민감하기 때문에 방어체계가 있어야 함
- 생물의 체내에선 효소의 최적화된 pH가 요구됨
- 대표적인 완충 용액: 인간의 혈액 (pH: 7.4)
- 인산염, 탄산수소염, 단백질 등에 의해 완충작용

1부 단백질 효소의 구조와 기능

3장 아미노산과 펩타이드
4장 단백질: 일차 구조의 결정
5장 단백질: 고차원 구조
6장 단백질: 마이오글로빈과 헤모글로빈
7장 효소: 작용 기전
8장 효소: 반응속도론
9장: 활성 조절
10장: 생물정보학과 컴퓨터 생물학

3장 아미노산과 펩타이드

- 20개의 아미노산의 구조
- 아미노산 명명법
- pI
- 아미노산의 R기
- 펩타이드의 방향성, 명명법, 일차구조

생의학적 중요성

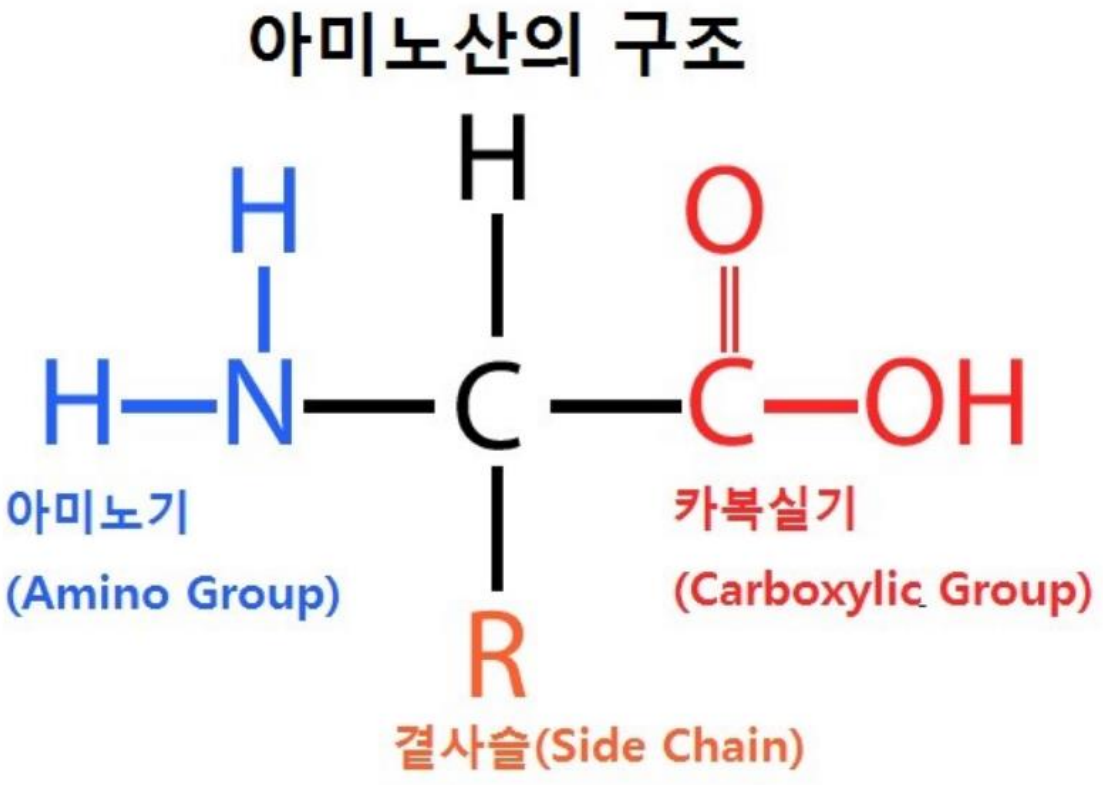
펩타이드

- 아미노산의 짧은 중합체
- 단백질을 구성
- 호르몬, 호르몬 분비 인자, 신경조절자, 신경전달물질 생합성
- 포르피린, 퓨린, 피리미딘, 요소 등 생합성

- 필수아미노산:생물의 몸 안에서 전구 물질로부터 합성할 수 없는 아미노산으로 음식을 통해 섭취해야 함

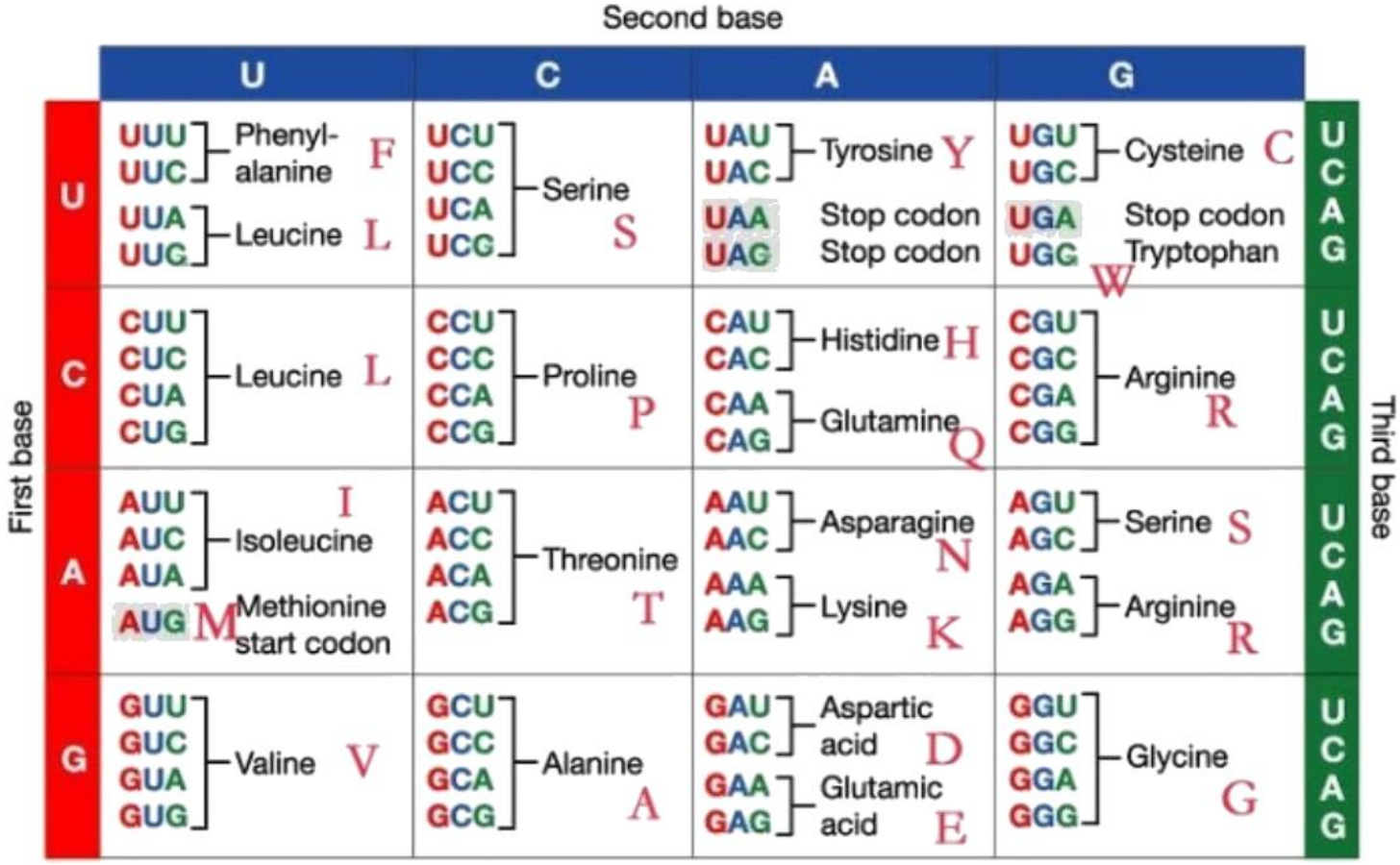
아미노산의 특성

아미노산(Amino acid): 염기성 아미노기($-NH_2$)와 산성의 카르복시기 (-COOH)를 가진 유기화합물의 총칭

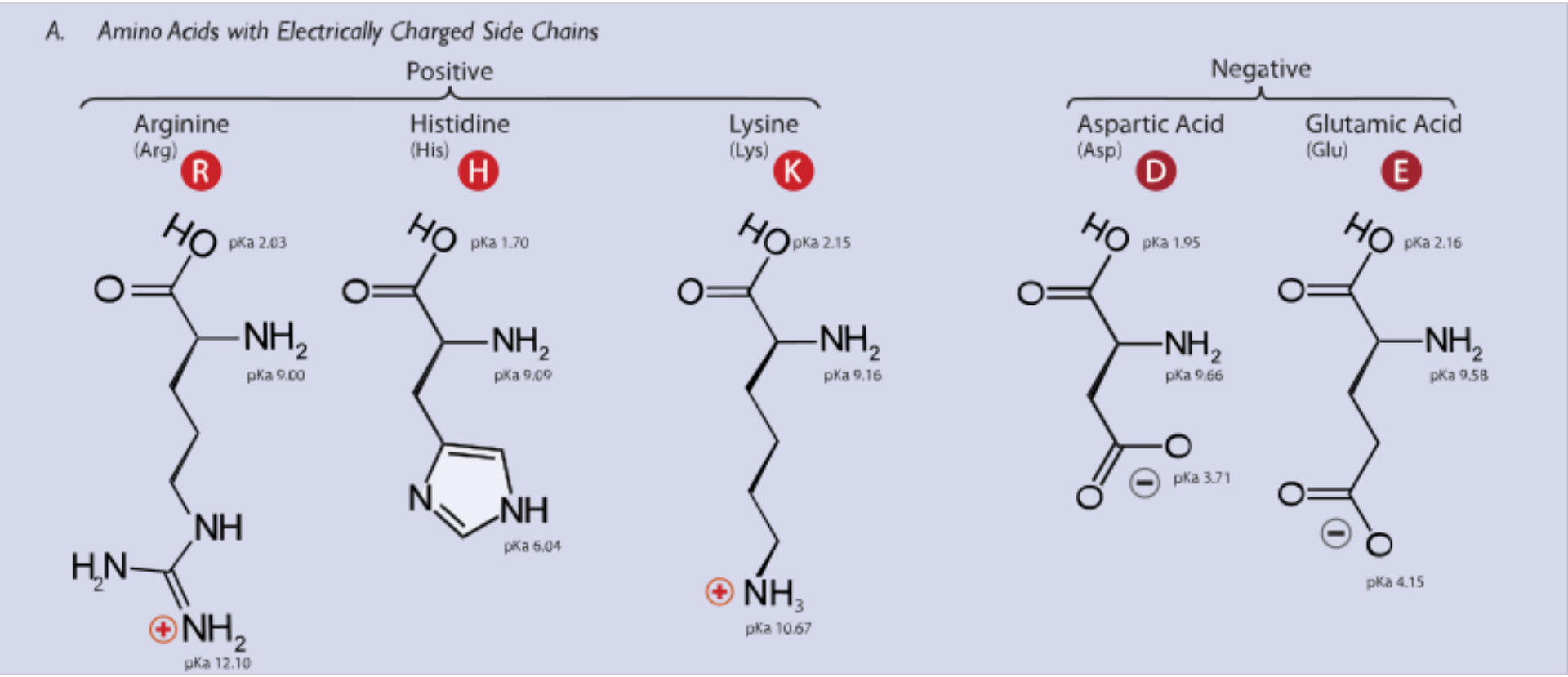


유전부호는 20가지 L-α-아미노산을 지정한다

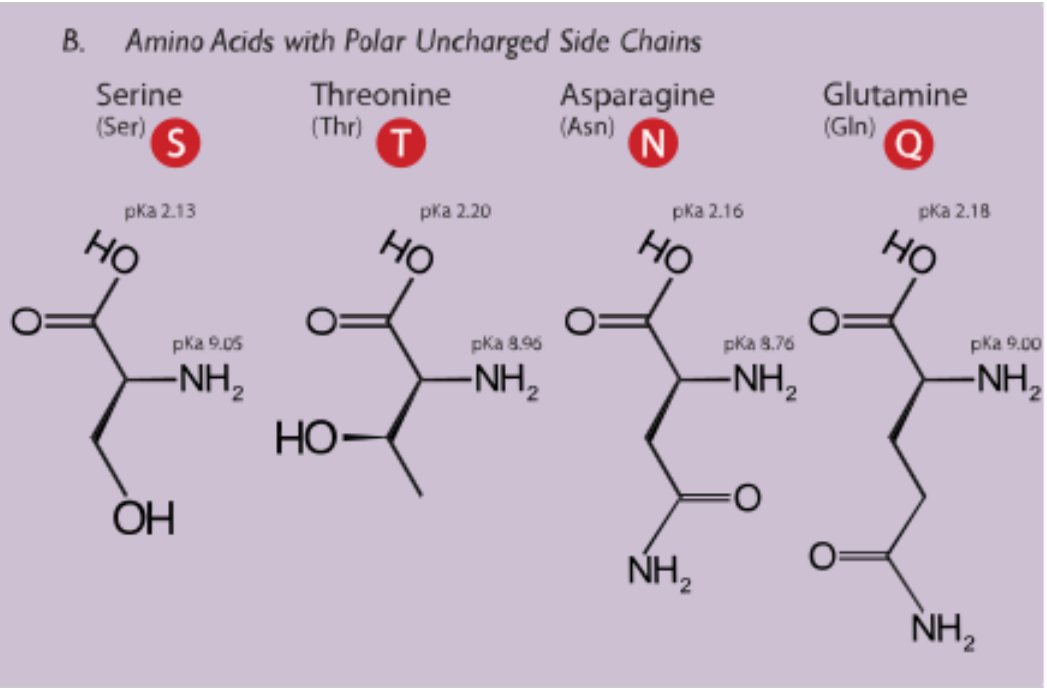
- 자연엔 300개가 넘는 아미노산이 존재
- 단백질을 구성하는 아미노산은 단 20개

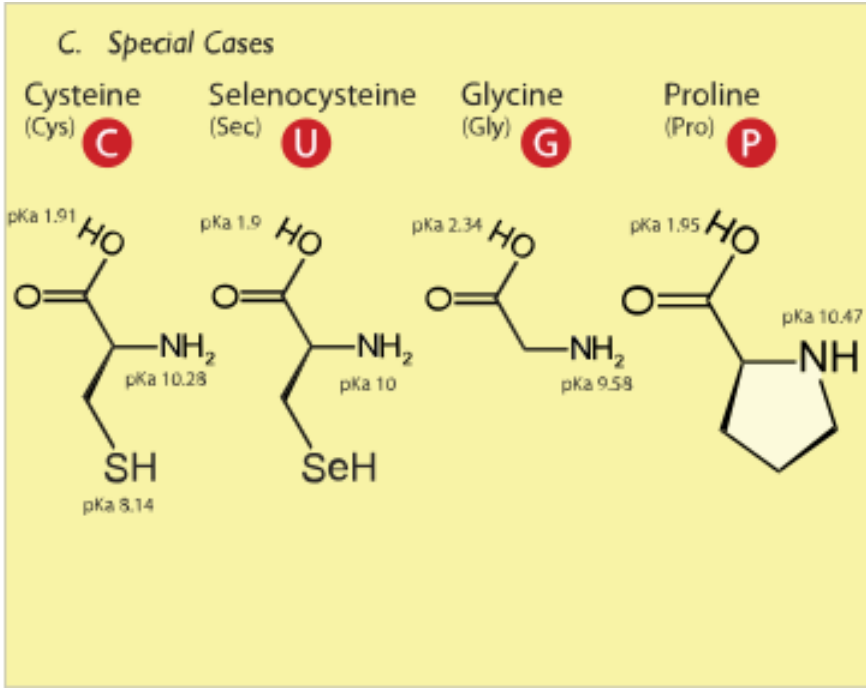


유전부호는 20가지 L-α-아미노산을 지정한다

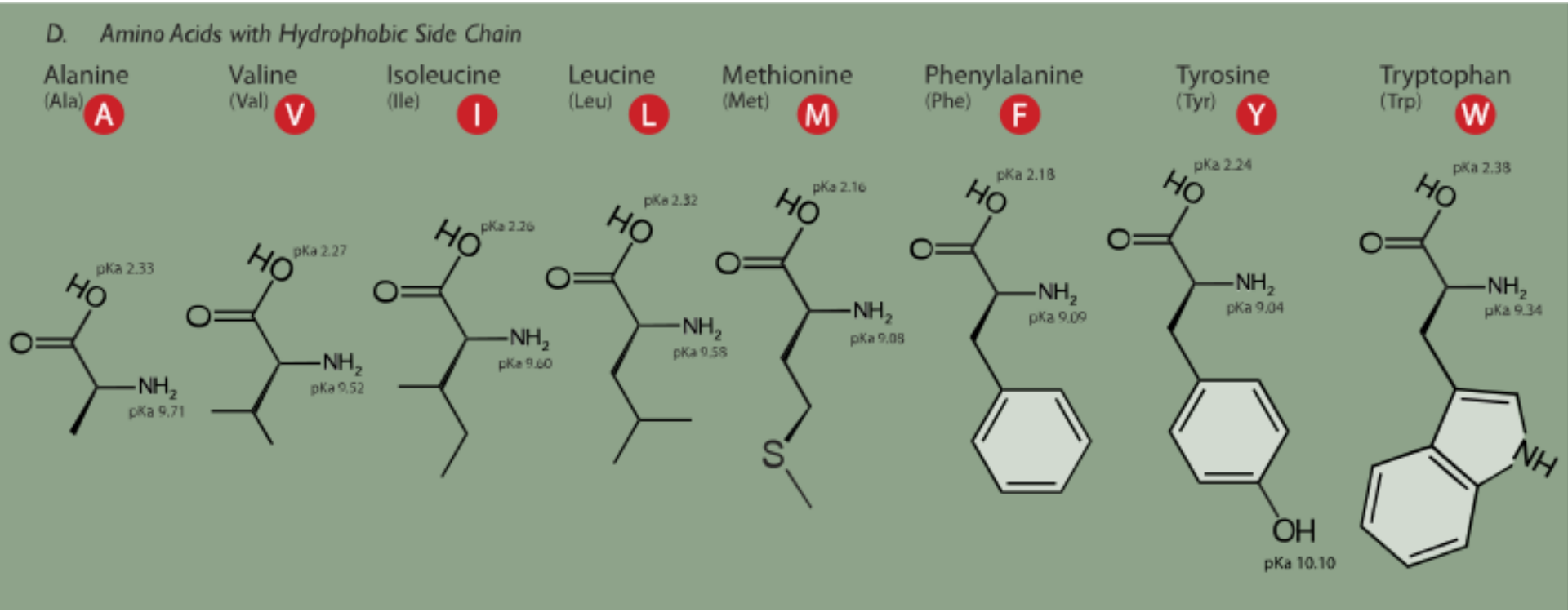


유전부호는 20가지 L-α-아미노산을 지정한다





유전부호는 20가지 L-α-아미노산을 지정한다

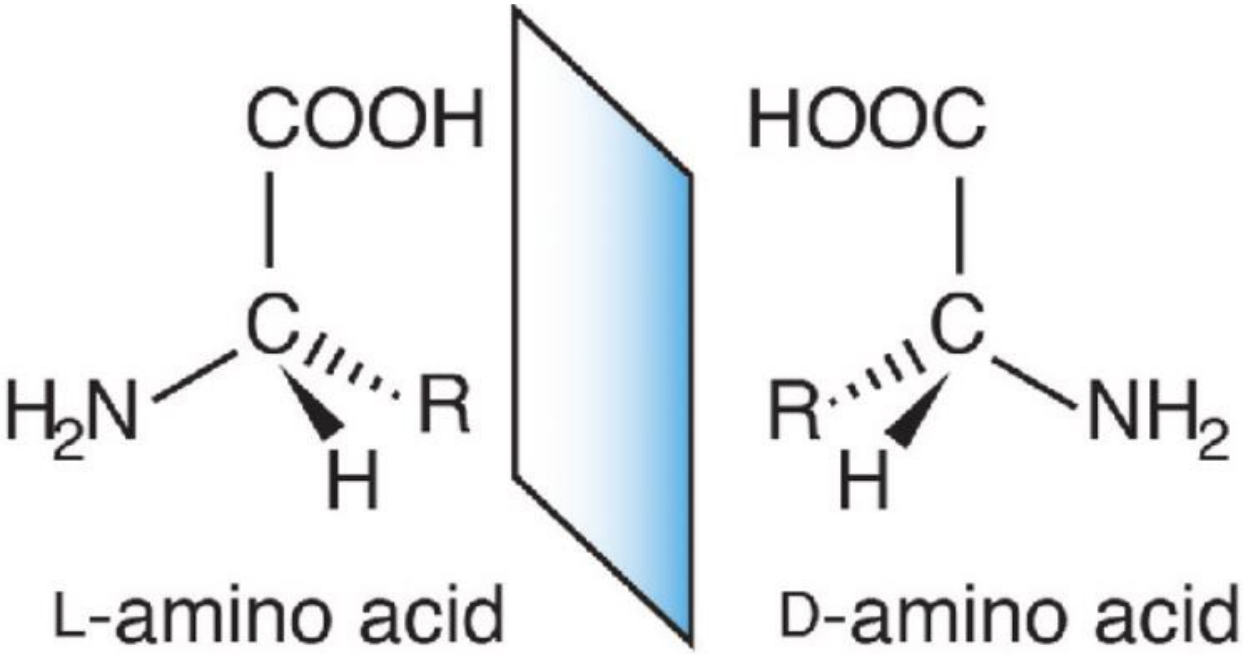


유전부호는 20가지 L-α-아미노산을 지정한다

이름	약자
A. 전하성 곁가지를 가지는 아미노산	
아지닌 Arginine (+)	Arg [R]
히스티딘 Histidine (+)	His [H]
라이신 Lysine (+)	Lys [K]
아스파트산 Aspartic acid (-)	Asp [D]
글루탐산 Glutamic acid (-)	Glu [E]
B. 비전하성 극성 곁가지를 가지는 아미노산	
세린 Serine	Ser [S]
트레오닌 Threonine	Thr [T]
아스파라진 Asparagine	Asn [N]
글루타민 Glutamine	Gln [Q]
C. 특이한 케이스	
시스테인 Cysteine	Cys [C]
셀레노시스테인 Selenocysteine	Sec [U]
글라이신 Glycine	Gly [G]
프롤린 Proline	Pro [P]
피롤라이신 Pyrrolysine	Pyl [O]
D. 무극성 곁가지를 가지는 아미노산	
알라닌 Alanine	Ala [A]
발린 Valine	Val [V]
아이소류신 Isoleucine	Ile [I]
류신 Leucine	Leu [L]
메싸이오닌 Methionine	Met [M]
페닐알라닌 Phenylalanine	Phe [F]
타이로신 Tyrosine	Tyr [Y]
트립토판 Tryptophan	Trp [W]

오직 L-α-아미노산만이 단백질에 존재한다

- 아미노산은 L/D형이 존재 (손대칭형, 거울형, 카이랄형 chiral)
- 단백질을 구성하는 아미노산은 모두 L형
- D-아미노산 역시 자연적으로 합성되며, 세균의 세포벽을 구성, 펩타이드, 항생제 등에 존재



Levorotatory: 좌회전의

Dextrorotatory: 우회전의

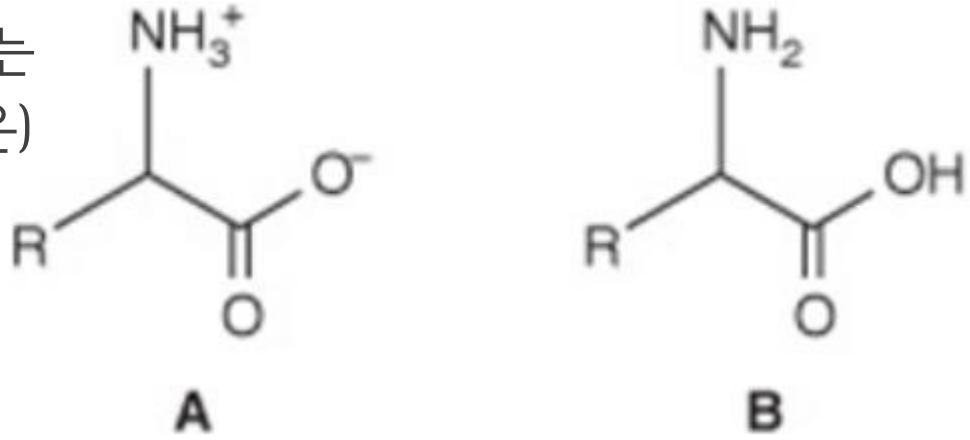
아미노산은 양성, 음성, 또는 0의 알짜 전하를 가질 수 있다

- 아미노산은 이온화가 가능

$$R—COOH \Leftrightarrow R—COO^- + H^+$$

$$R—NH_3^+ \Leftrightarrow R—NH_2 + H^+$$

혈액, 조직에서는
주로 A형태 (이온)



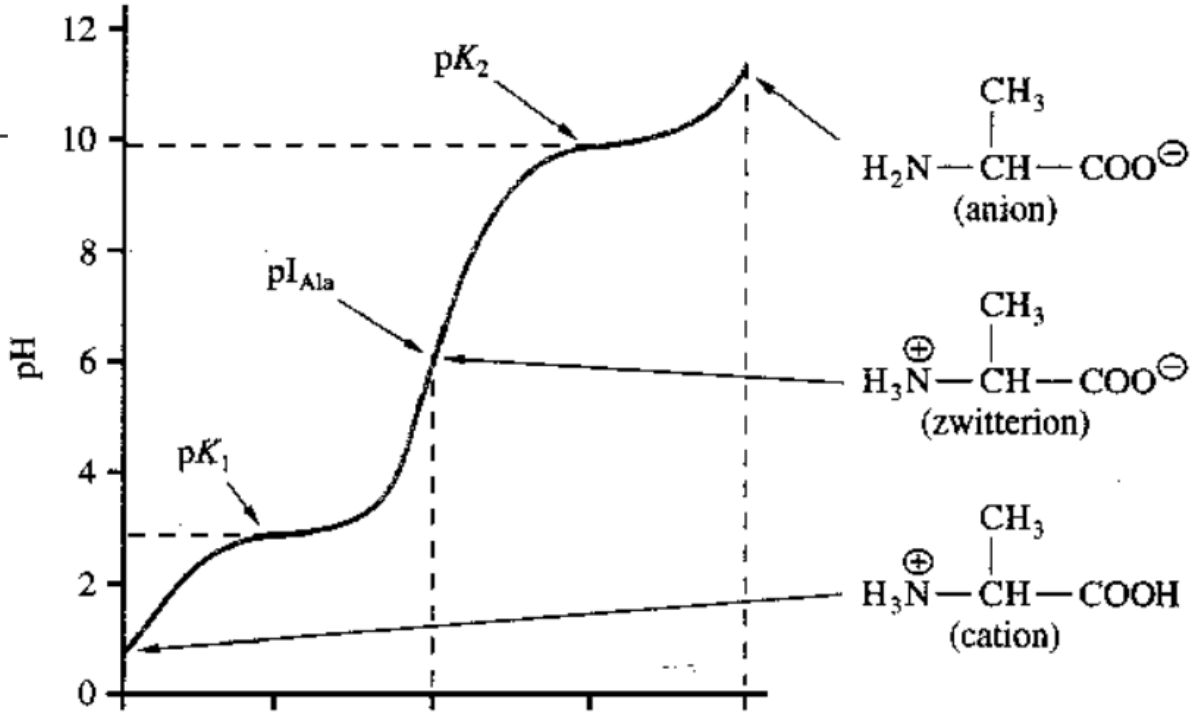
양쪽성이온(zwitterion):

- 같은 수의 반대 전하를 포함하여 알짜 전하가 없는 분자
- 양전하와 음전하의 수를 동등하게 가지고 있는 분자

pK_a는 약산의 세기를 표현한다

- 약산의 세기는 pK_a로 표현
- 알짜 전하는 그룹의 pK_a의 값, 주변 매체의 pH값에 따라 결정
- pH값을 변화시키면 아미노산의 전하가 변화

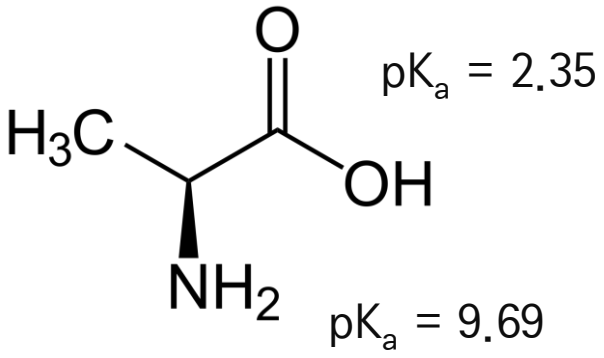
- 산성: $-COOH$, $-NH_3^+$
- 중성: $-COO^-$, $-NH_3^+$
- 염기성: $-COO^-$, NH_2



등전 pH에서 아미노산은 알짜 전하를 갖지 않는다

등전점 (isoeletric point, pI)

- 특정분자가 전기적인 전하를 띠지않고 중성상태인 pH
- 양전하와 음전하의 개수가 같아져 실제적인 전하가 없는 상태
- 평균 전하가 0이 되는 pH



계산 방법 예) 알라닌의 경우,

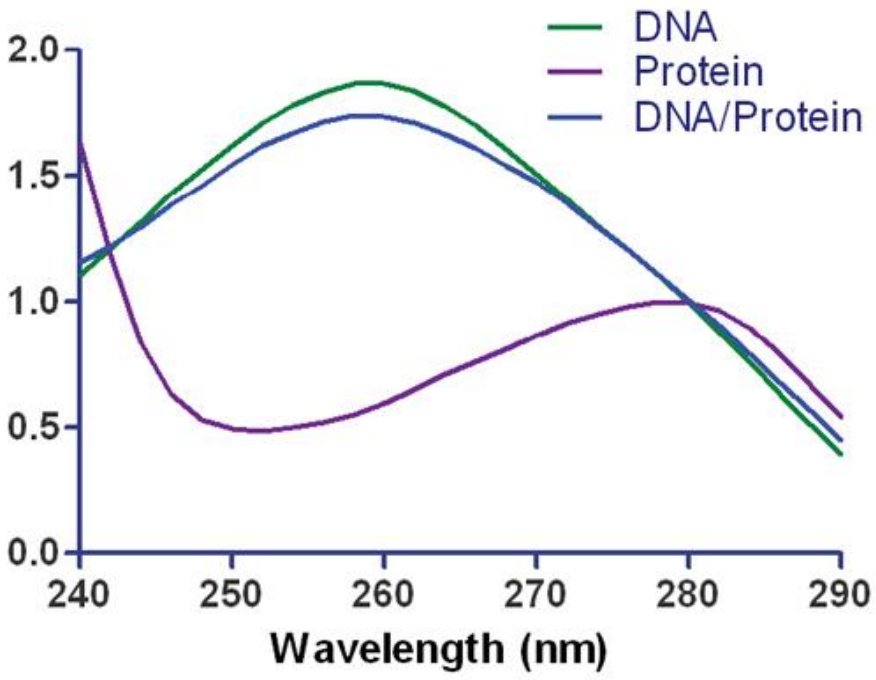
첫 번째 pKa (R—COOH) = 2.35

두 번째 pKa (R—NH_3^+) = 9.69

알라닌의 등전 pH(pI) = (2.35+9.69)/2 = 6.02

아미노산의 용해도는 그들의 이온의 성질을 반영한다

- 물과 에탄올 (극성 용액)에 잘 녹음 ∵ 극성 작용기
- 벤젠, 헥산, 에테르 같은 비극성 용매에는 녹지 않음
- 가시광선 흡수하지 않기 때문에 무색
- 타이로신, 페닐알라닌, 트립토판은 자외선(250-290nm)흡수
- 단백질은 280nm에서 검출

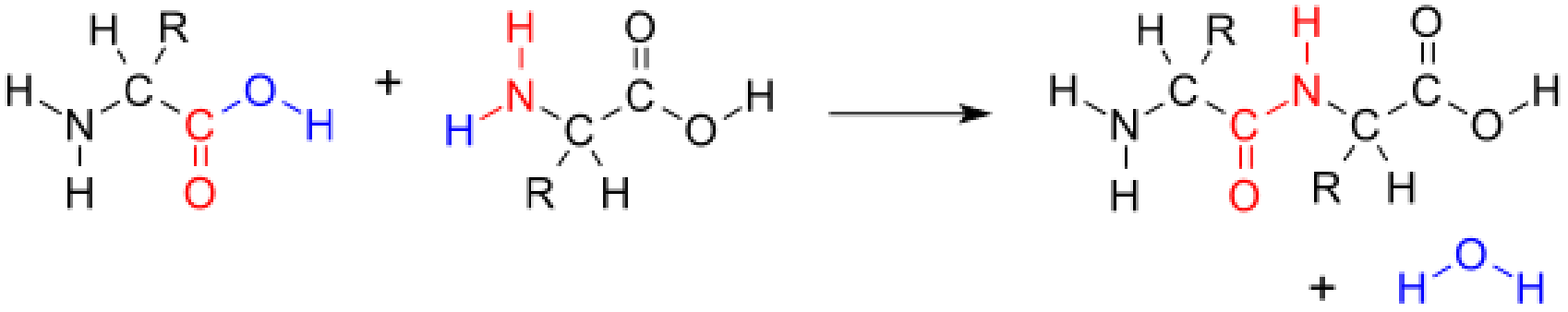


α-R기는 각각의 아미노산의 특성을 결정한다

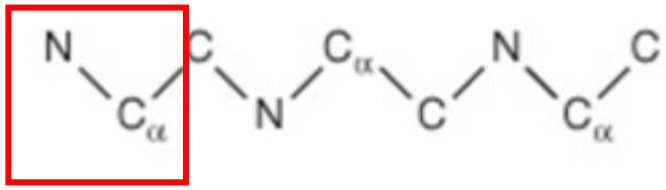
- 글라이신(R기 -H): 펩타이드가 날카롭게 구부러지는 지역에서도 존재 가능
- 소수성, 방향족 R기: 세포질 단백질 내부에 존재
- 염기성, 산성, 전하를 띠는 R기: 단백질의 구조를 안정화
- 히스티딘: 효소 촉매 작용
- 시스테인: -SH기, 촉매작용
- 세린, 타이로신, 트레오닌: -OH기, 효소 활성 조절

작용기는 아미노산의 화학 반응을 결정한다

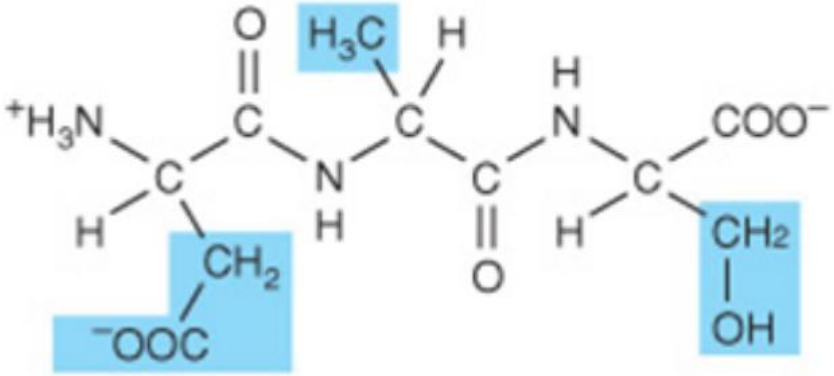
- 카복실산(-COOH): 에스터, 아마이드, 산무수물 형성
- 아미노기($-NH_2$): 아실화, 아마이드화, 에스터화 반응에 참여
- 알코올기(-OH): 산화 반응에 참여
- 싸이오알코올기(-SH): 에스터화 반응에 참여
- 펩타이드 결합: $-COOH + -NH_2 \rightarrow -CO-NH- + H_2O$



펩타이드 구조는 그리기 쉽다



자유 α-아미노기를 갖는 잔기를 왼쪽에
사슬 골격은 지그재그로
펩타이드 결합 표현



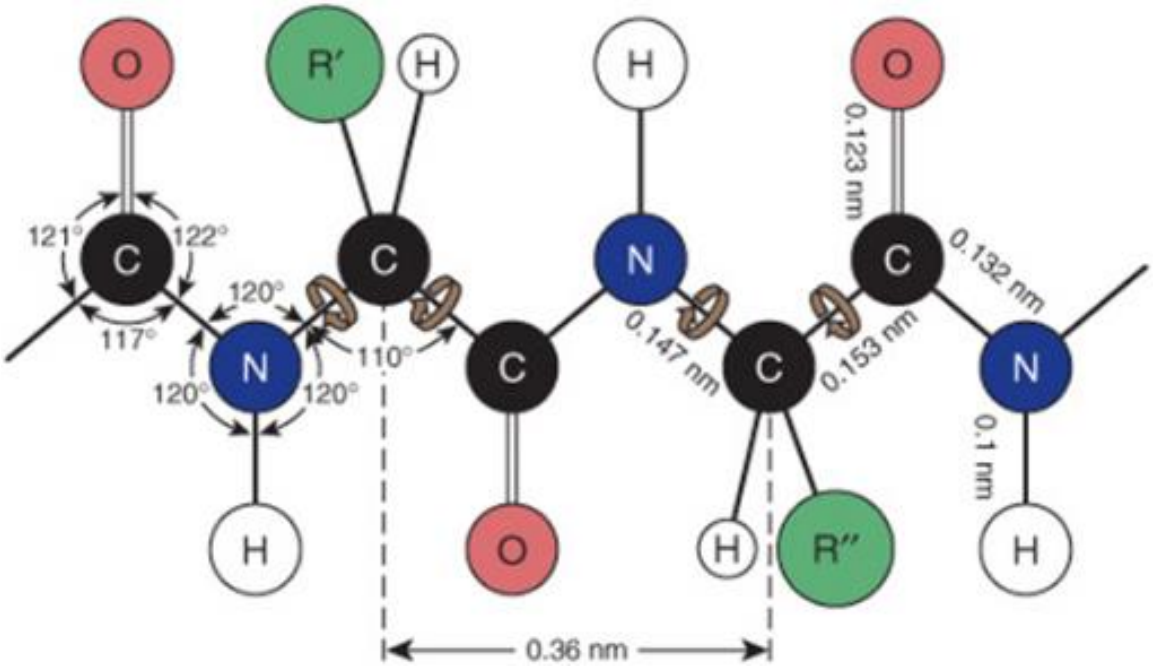
α-탄소 원자에 R기 추가

Glu - Ala - Lys - Gly - Tyr - Ala

E A K G Y A

펩타이드 결합은 부분적으로 이중결합의 성질을 가진다

- 펩타이드 결합은 단일결합으로 연결된 것처럼 표시하지만, 부분적 이중결합의 성질을 갖고 있음
- 탄소와 질소원자를 연결하는 결합주위로 회전이 자유롭지 X
- O, C, N, H가 같은 평면에 위치



요약

- 단백질에는 L-α-아미노산만 발견
- 모든 아미노산은 두 개의 작용기 ($R—NH_3^+$, R—COOH)
- pI는 아미노산의 알짜전하가 0이 되는 pH
- 아미노산은 펩타이드 결합 형성으로 이루어짐
- R기에 따라 생화학적 반응이 결정