

**ГИДРАТАЦИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ  
МОЛЕКУЛ И *ОРТО- ПАРА-* МОЛЕКУЛЫ  $H_2O$**

**Дроздов А.В.**

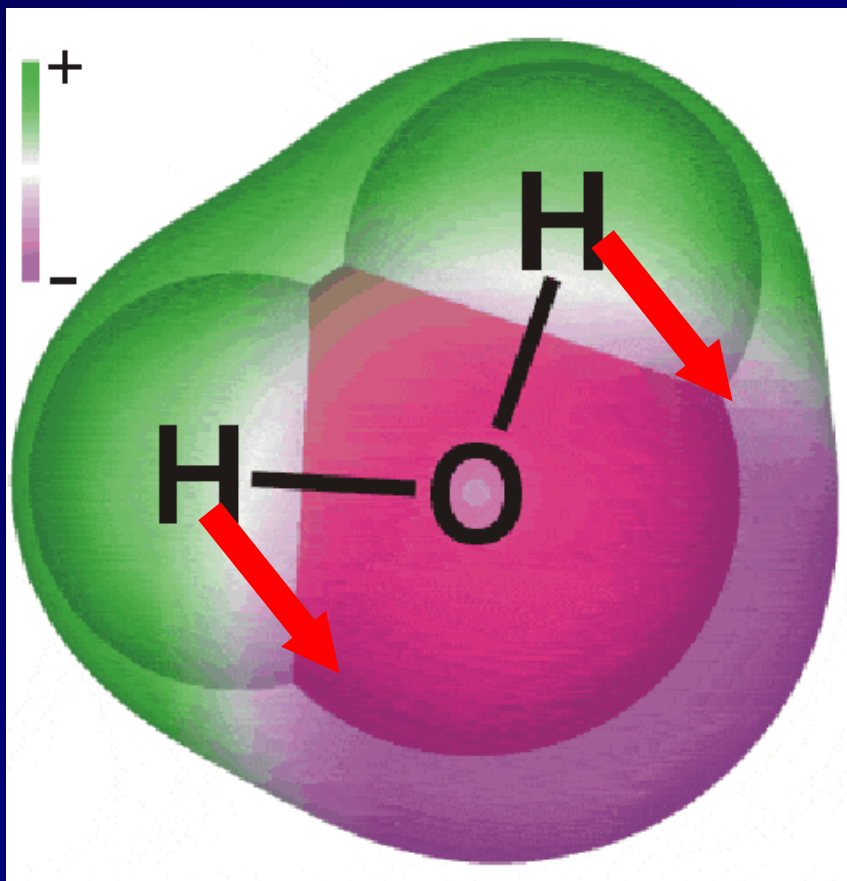
**Институт Аналитического приборостроения РАН  
Санкт-Петербург, Россия**

**[av@biophys.ru](mailto:av@biophys.ru)**

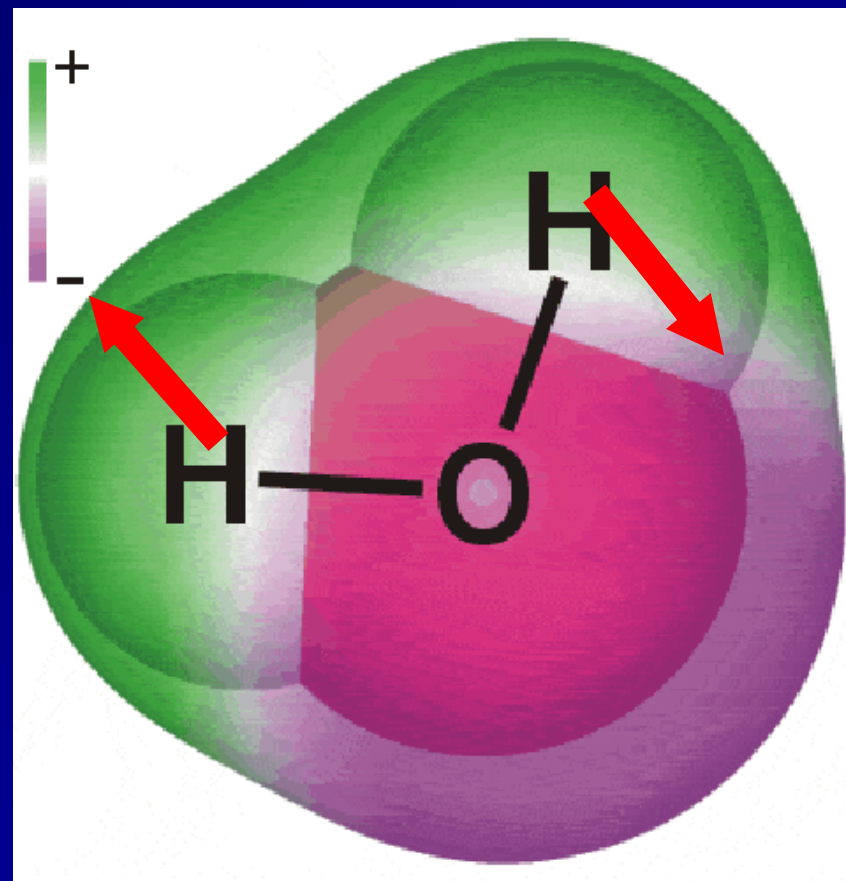
# Часть 1. Физическая

# Орто- и пара- изомеры $\text{H}_2\text{O}$

Орто-изомер



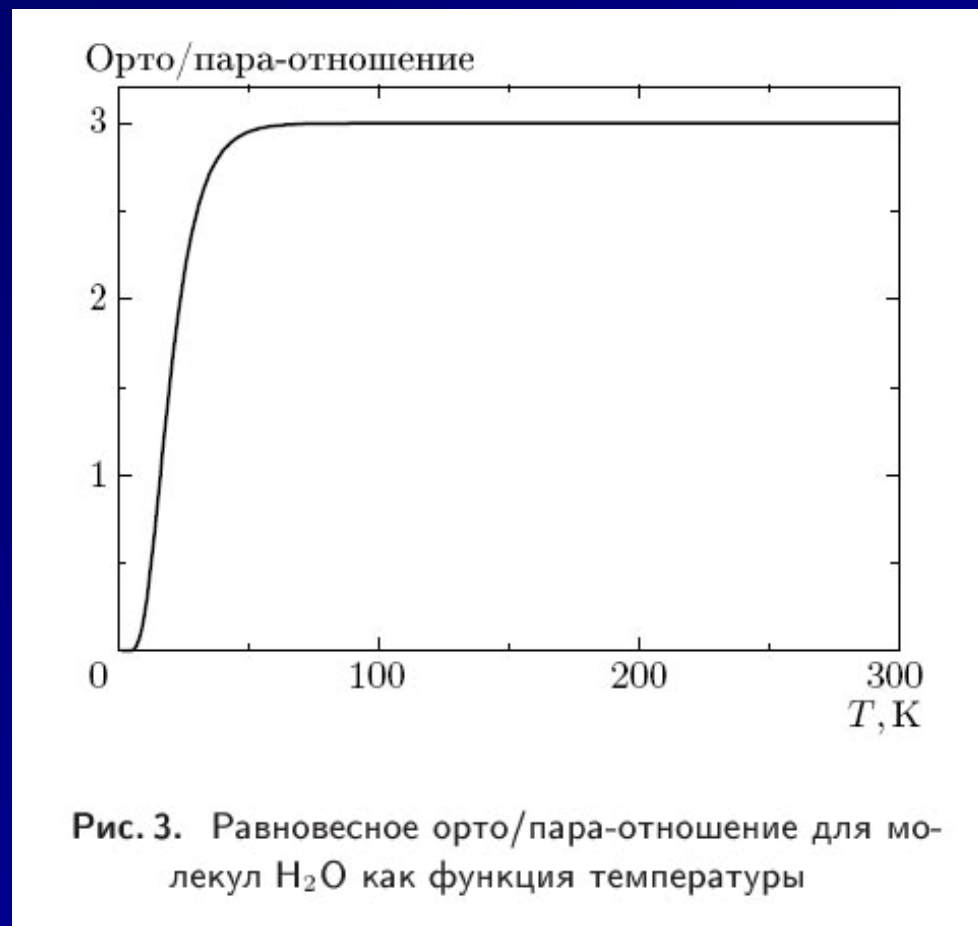
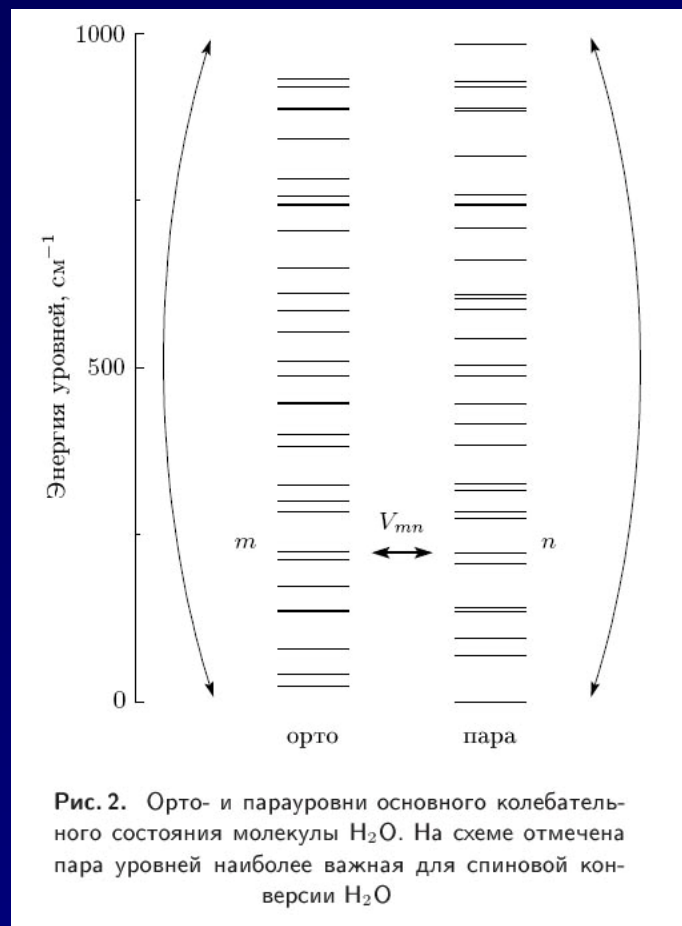
Пара-изомер



# Несколько слов про спин изомеры

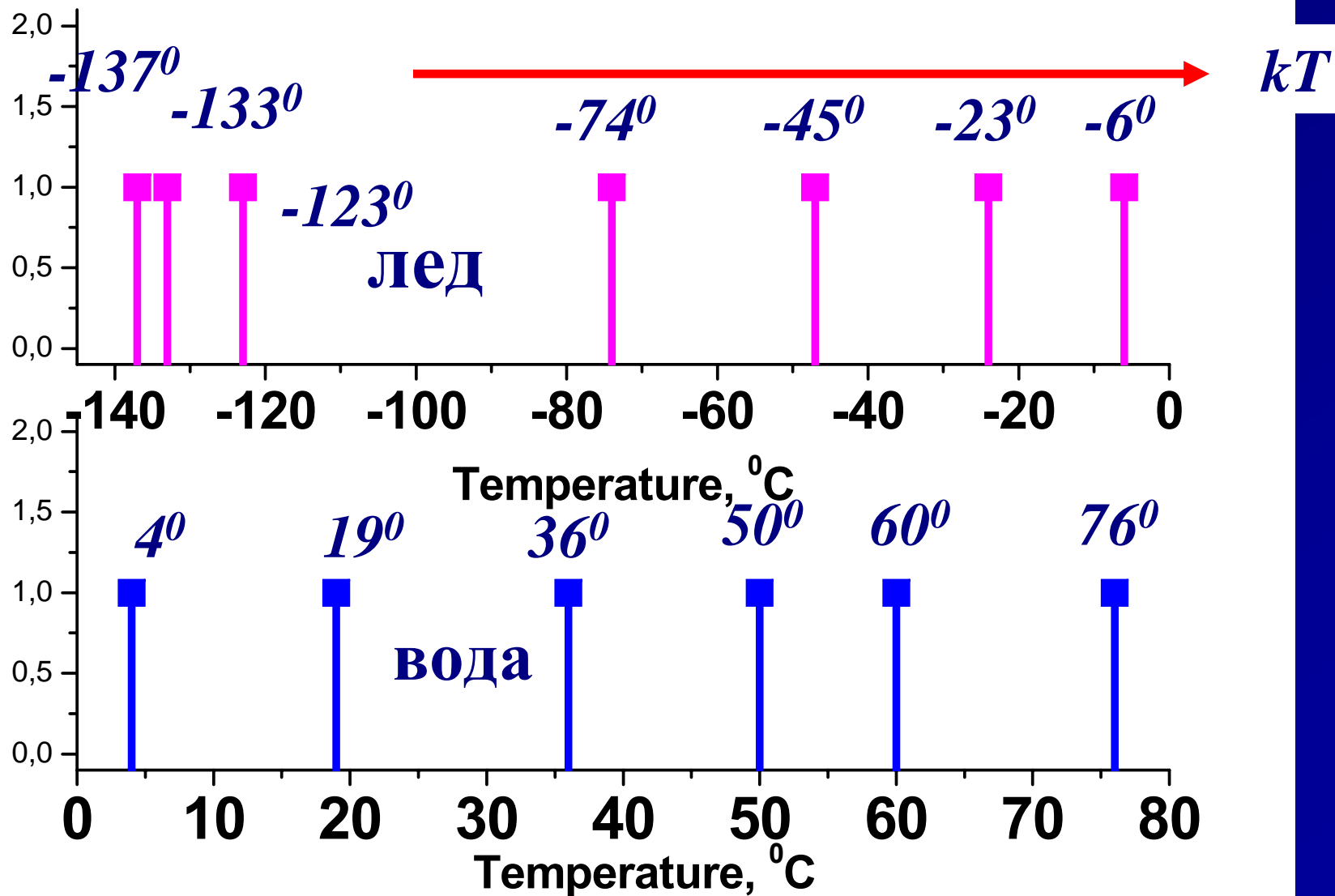
- Исходя из квантово-механического принципа неразличимости волновая функция описывающая систему в состав которой входит две одинаковые частицы имеет всего две возможности— волновая функция либо симметрична (т.е. совершенно не меняется при перестановке частиц), либо антисимметрична (т.е. при перестановке меняет знак).
- Например для  $H_2$  этот принцип реализуется в том, что его молекулярные состояния должны быть разделены на два вида, практически не комбинирующие друг с другом. Орто- $H_2$  ( $oH_2$ ) и пара- $H_2$  ( $pH_2$ ).
- Из квантовой механики также вытекает: взаимная связь между ориентировкой ядерных спинов и ротационными квантовыми числами, а также запрещение перехода между  $oH_2 \leftrightarrow pH_2$ .
- Взаимные переходы  $oH_2 \leftrightarrow pH_2$ :
  - - излучение (время половинного превращения  $\sim 300$  лет);
  - - термический переход  $H + pH_2 \leftrightarrow oH_2 + H (\uparrow + \uparrow\downarrow \leftrightarrow \uparrow\uparrow + \downarrow)$ ,  $\sim$  мин;
  - - под действием неоднородного магнитного поля.
- При превращении  $oH_2 \rightarrow pH_2$  выделяется тепло - 1418 Дж/моль.
- При низких температурах физико-химические свойства  $oH_2$  и  $pH_2$  различаются.

# Энергитические уровни и соотношение орто- и пара-изомеров $\text{H}_2\text{O}$

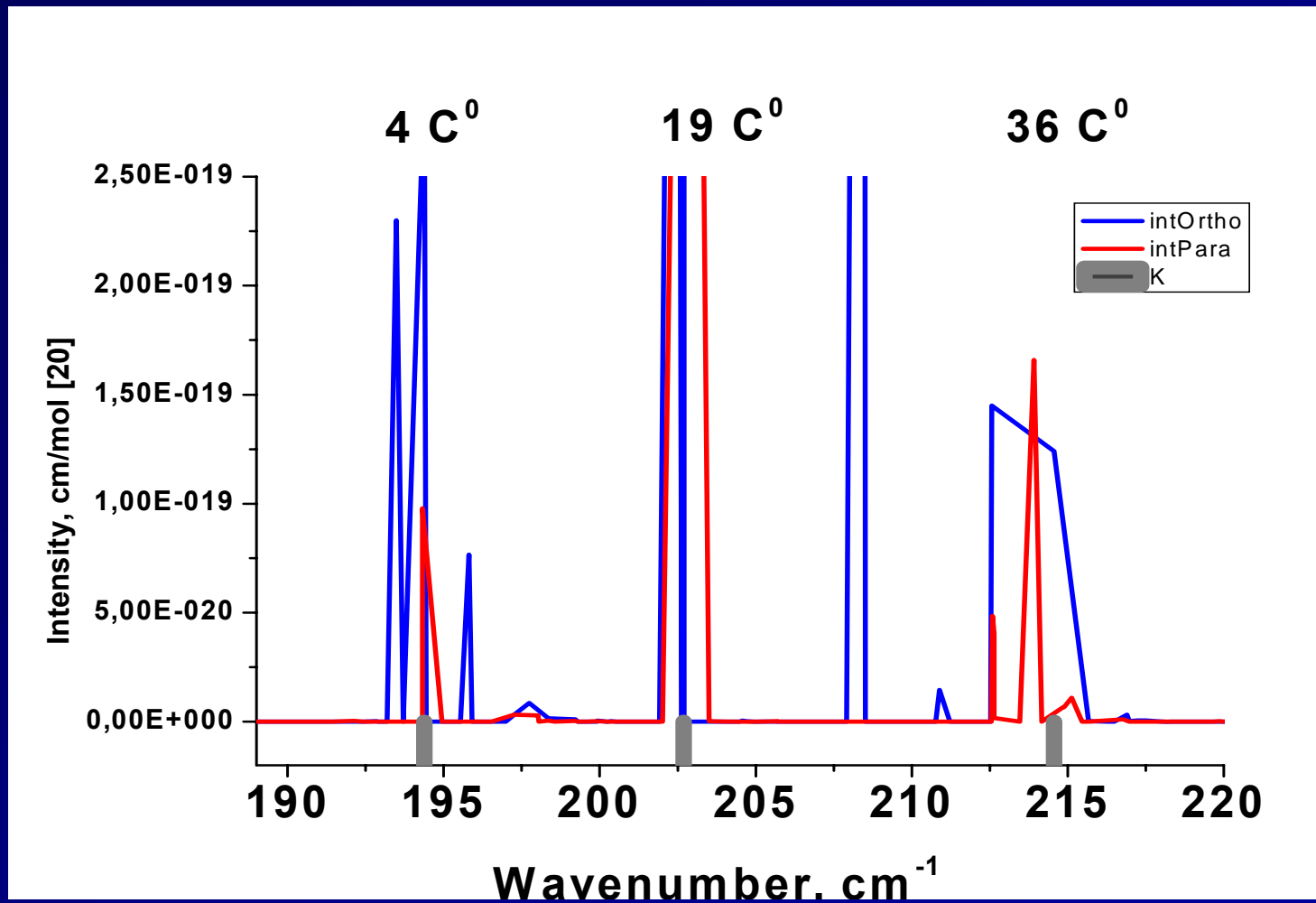


# Значения особых температурных точек

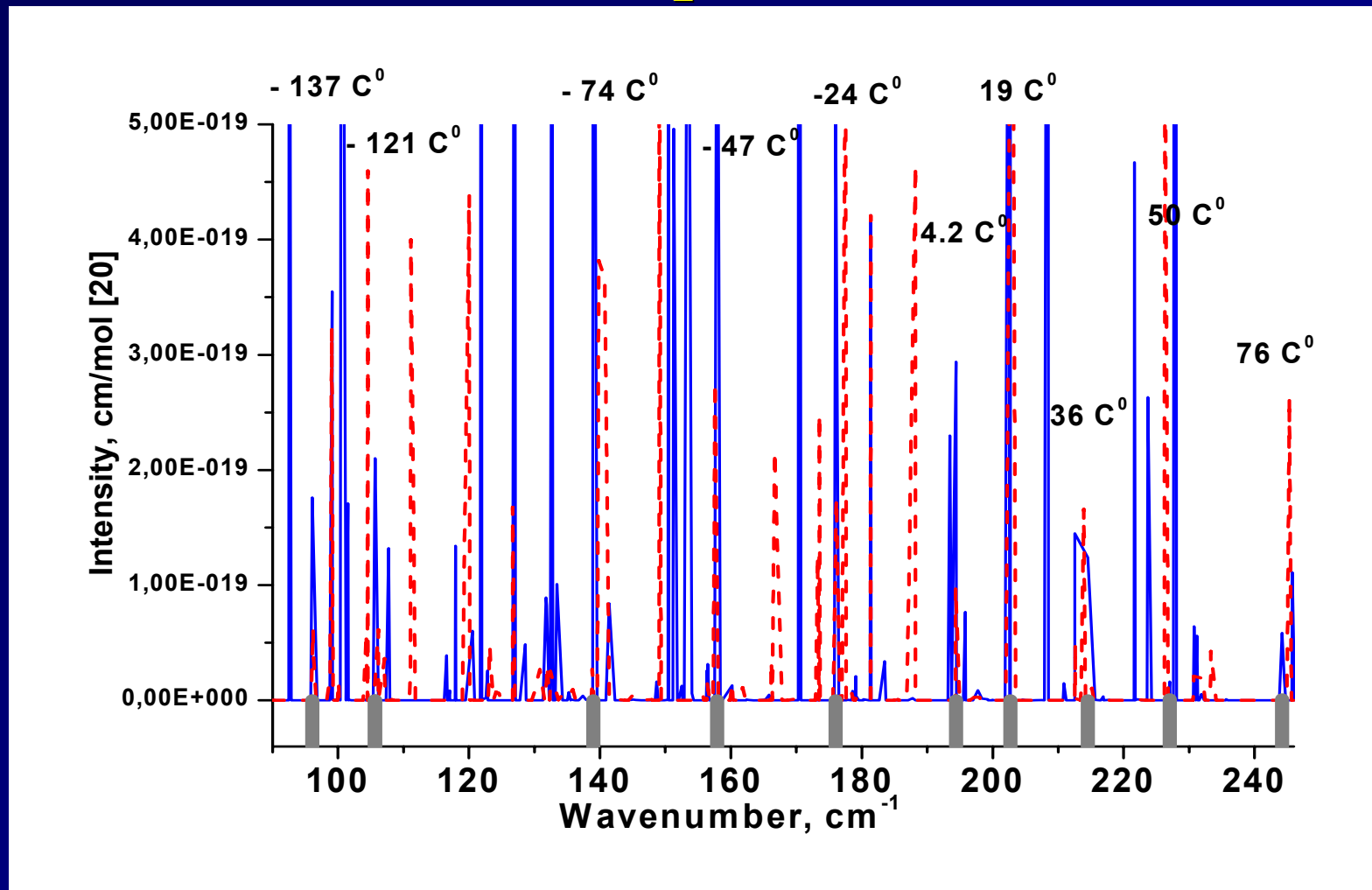
## льда и воды



# Совпадение энергии $kT$ и энергии $h\omega$ вращения орто/пара изомеров в области особых точек $H_2O$

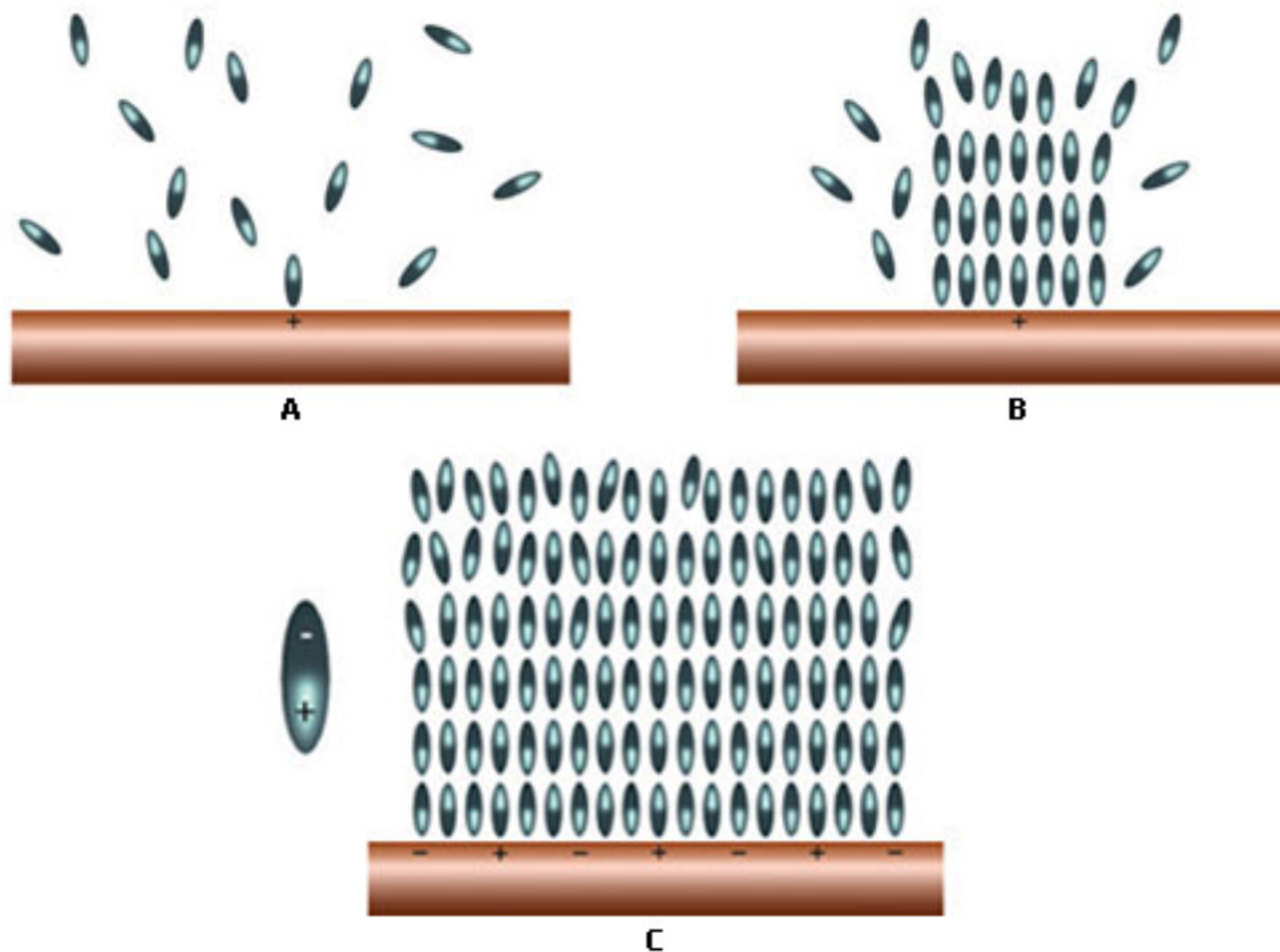


# Совпадение энергии $kT$ и энергии $h\omega$ вращения орто/пара изомеров в области особых точек $H_2O$

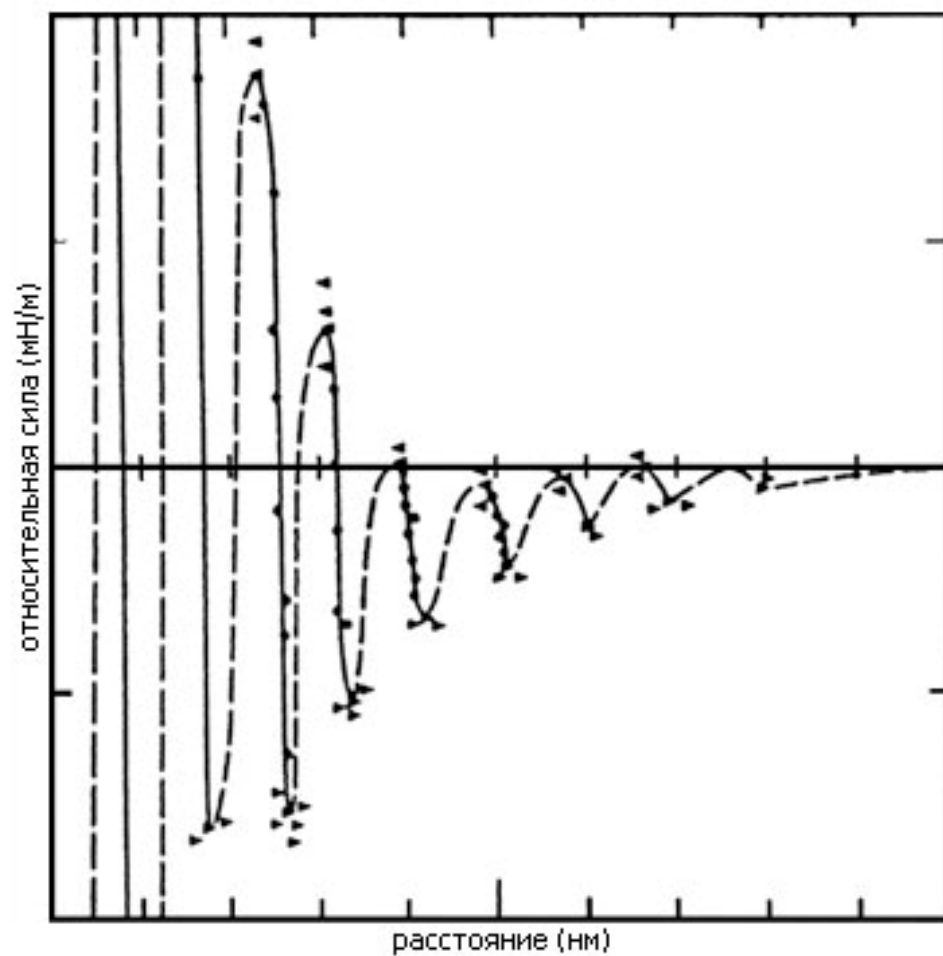




# Часть 2. Биологическая



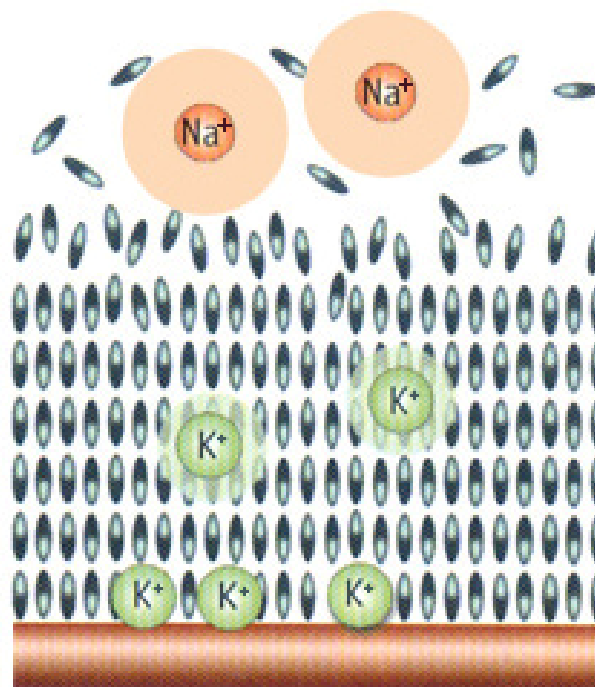
Процесс организации молекул воды вблизи белковых поверхностей. (А) Диполи воды притягиваются заряженными участками на молекуле белка. (В) Адсорбированные диполи вызывают адсорбцию еще большего количества диполей. (С) Дополнительные заряженные участки на поверхности белка расширяют и укрепляют дипольную сеть.



Эффект ступенчатого возрастания усилия, прилагаемого к двум близко расположенным слюдяным пластинкам. Показан лишь участок с колебаниями.

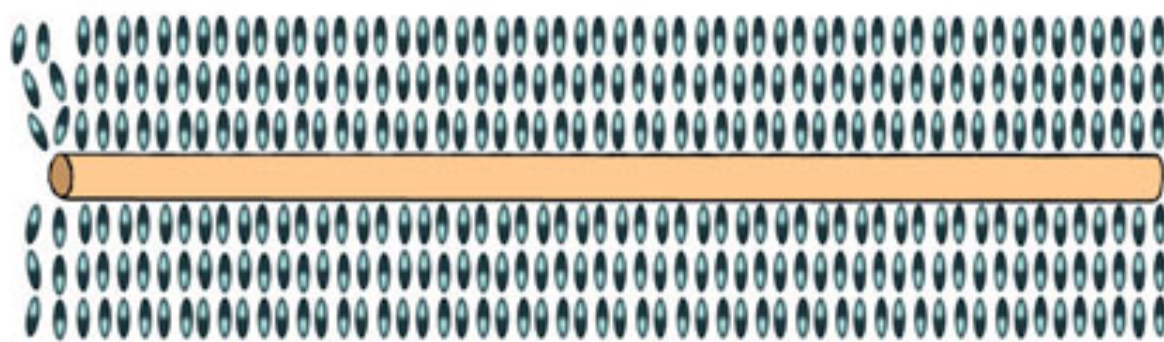
рисунок 4.2





Размер гидратированного иона определяет его способность проникать в структурированную воду, а также его сродство к молекулам белков.





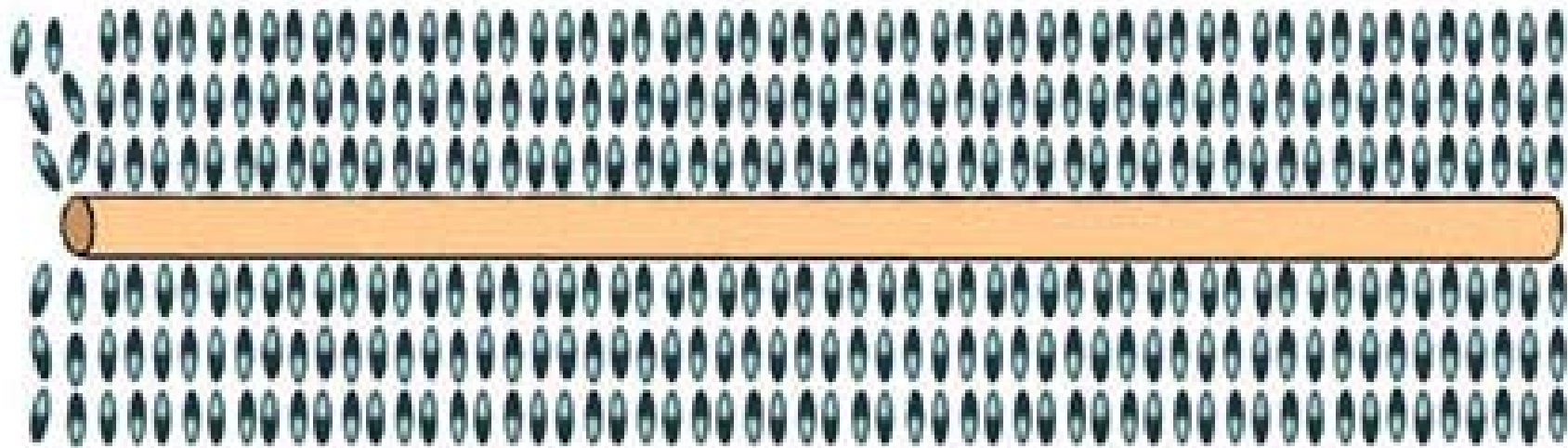
Переход из длинной конфигурации в короткую. В удлиненном состоянии молекула полимера окружена структурированной водой, в укороченном - деструктурированной.

рисунок 8.4

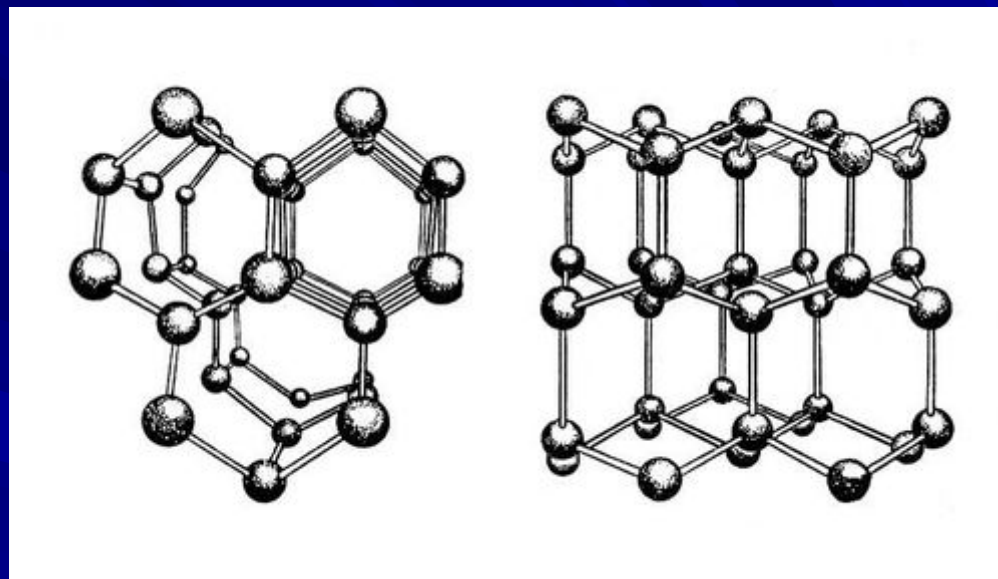
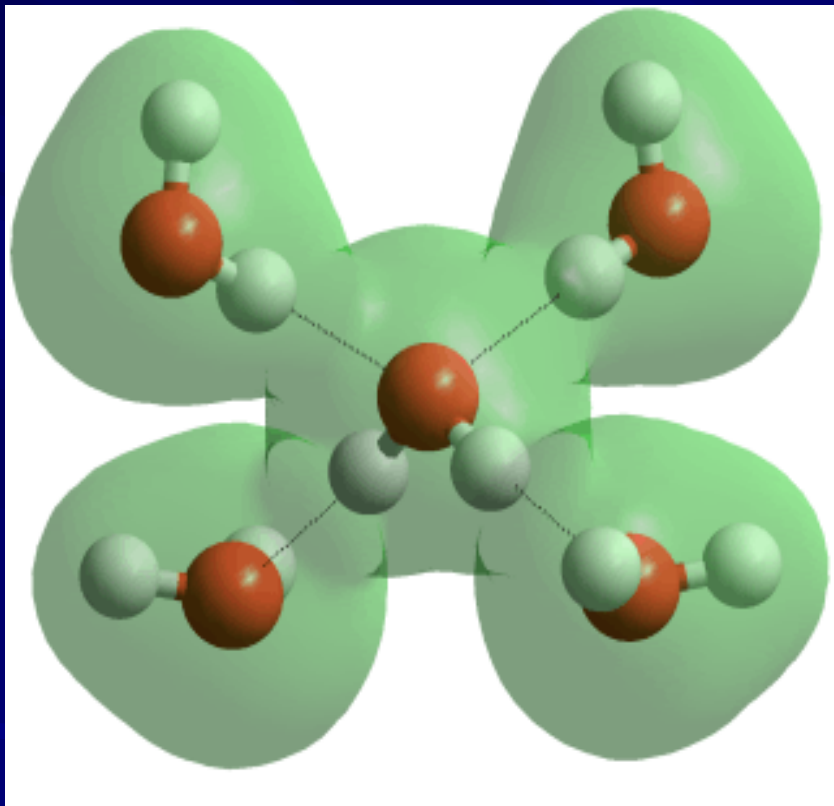


# **Часть 3. Физико-биологическая**

# Еще раз о связанной воде



# Структура льда $I_h$





# Орто- и пара- изомеры $\text{H}_2\text{O}$ и их возможная роль в биологии

Орто- и пара- изомеры  $\text{H}_2\text{O}$  должны по разному  
адсорбироваться на поверхности в том числе на  
поверхности биомолекул



Изменение соотношения орто- $\text{H}_2\text{O}$ /пара- $\text{H}_2\text{O}$  должно  
приводить к изменению степени гидратации  
биомолекул



К изменению их биологической активности.

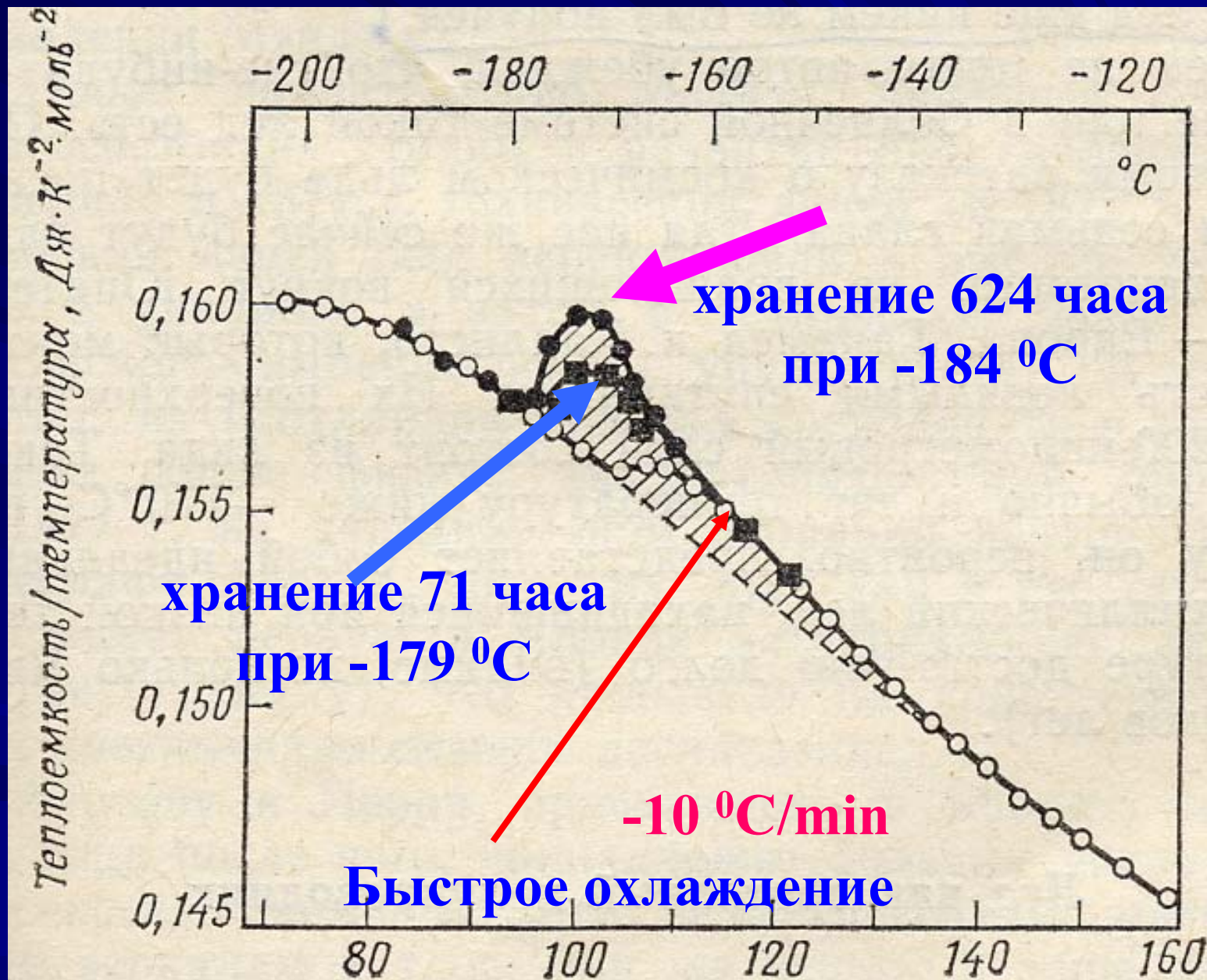
**Спасибо за внимание**

**Похоже** маленький спин играет

**БОЛЬШУЮ**

**Роль :-)**

# Эволюция $C_p$ льда; Хайда и др. 1972г.



# Эволюция $C_p$ льда

Haida O., Matsuo T., Suga H., Seki S.

Relaxation proton ordering and glassy crystalline state in hexagonal ice,

Proc.Japan Acad. 48, #7, 489, 1972

