السلام عليكم ورحمة الله وبركاته

Water and pH

تشمل خصائصه الفيزيائية الفريدة ما يلي:

- القدرة على إذابة مجموعة واسعة من الجزيئات العضوية وغير العضوية من خلال قدرتها الاستثنائية على تكوين روابط هيدروجينية.
- محب للنواة ممتاز، الماء هو متفاعل أو منتج في العديد من التفاعلات الأيضية.
- الماء لديه ميل طفيف للانفصال إلى أيونات هيدروكسيد و البروتونات.

Water

الماء هو المكون الكيميائي السائد للكائنات الحية.

- Water is the predominant chemical component of living organisms.

- Its unique physical properties include:
  - The ability to solvate a wide range of organic and inorganic molecules by its exceptional capacity for forming hydrogen bonds.
  - An excellent nucleophile, water is a reactant or product in many metabolic reactions.
  - Water has a slight propensity to dissociate into hydroxide ions and protons.

شحنة سالبه

يعني الماء بتفكك الى (H_3O^+, OH^-)

- Normal blood pH ranges from 7.35-7.45
  - Acidosis (blood pH < 7.35) include diabetic ketosis and lactic acidosis.
  - Alkalosis (pH > 7.45) may, for example, follow vomiting of acidic gastric contents.

يتراوح الرقم الهيدروجيني الطبيعي للدم من 7.35-7.45

- الحماض (درجة الحموضة في الدم <7.35) تشمل الكيتوزية السكرية واللاكتيك الحماض.
- قد يتبع القلوية (الرقم الهيدروجيني> 7.45)، على سبيل المثال، القيء الحمضي محتويات المعدة.

Acidosis انت استفرغت بصير عندي حموضة المعدة بس ركزي ما بكون عندي

Alkalosis بكون عندي

الماء هو مذيب بيولوجي مثالي

Water Is an Ideal Biologic Solvent

شويعني؟ قطبين عن طريق زوجين الاكترونات تبعون الاوكسجين

جزيئات الماء تشكل ثنائيات الأقطاب
● جزيء الماء غير منتظم، قليلا
رباعي السطوح المنحرف مع الأكسجين في مركزه.

Water Molecules Form Dipoles

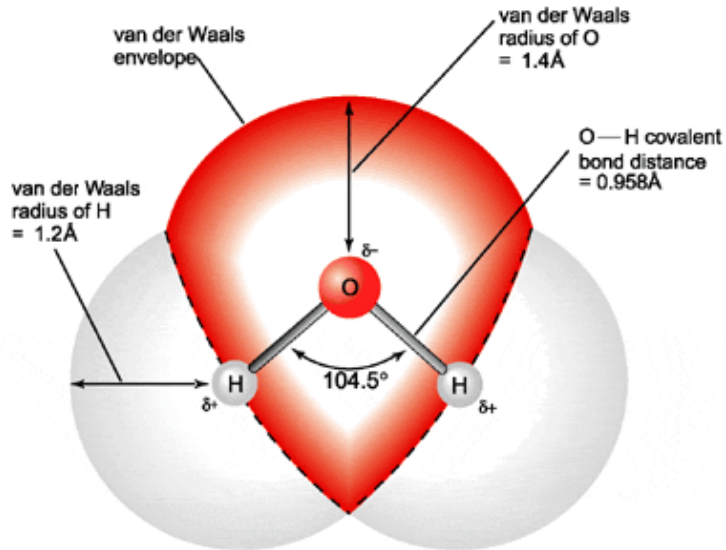
- A water molecule is an irregular, slightly skewed tetrahedron with oxygen at its center.

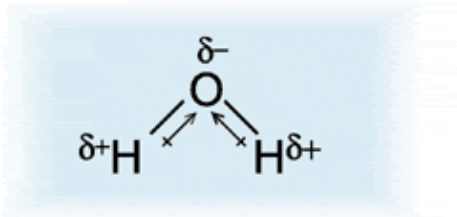
الماء ثنائي القطب، جزيء كهربائي الشحنة الموزعة بشكل غير متماثل حول هيكل.

- Water is a **dipole,** a molecule with electrical charge distributed asymmetrically about its structure.

ذرة الأكسجين السالبة للكهربائ بقوة يسحب الإلكترونات بعيدا عن الهيدروجين النوى، مما يتركها إيجابية جزئية الشحنة، في حين أن زوجي الإلكترونات غير المشتركة تشكل منطقة ذات شحنة سالبة محلية

- The strongly electronegative oxygen atom pulls electrons away from the hydrogen nuclei, leaving them with a partial positive charge, while its two unshared electron pairs constitute a region of local negative charge.





ترتيب مين اعلى كهروسلبية:

F كهروسلبية بتزداد من اليسار الى اليمين ومن
O
N الاسفل إلى الأعلى في جدول الدوري

خلينا نفهم هاي الصفحة بشكل بسيط : عنا إشي اسمه ثابت العزل هذا بتناسب عكسي مع قوة تجاذب بين الجزيئات المتعاكسة في شحنة فاذا قل زادت قوة تجاذب

بحكيلك انو في فراغ ثابت العزل قليل فاذا قوى تجاذب عالية اذا مش سهل اذوبها

اما في الماء ثابت العزل كبير اذا قوى تجاذب قليلة اذا سهل اذوبها

dielectrical constant قوى تفاعل بين اثنين شحنتهم متعاكسة سالب وموجب بتقل لما يزيد

Water Is an Ideal Biologic Solvent

الماء، ثنائي القطب القوي، له ثابت عازل مرتفع. كما تم وصفه كميا بقانون كولوم، قوة التفاعل بين الجسيمات المشحونة بشكل معاكس هو عكسي يتناسب مع ثابت العزل الكهربائي للوسط المحيط.

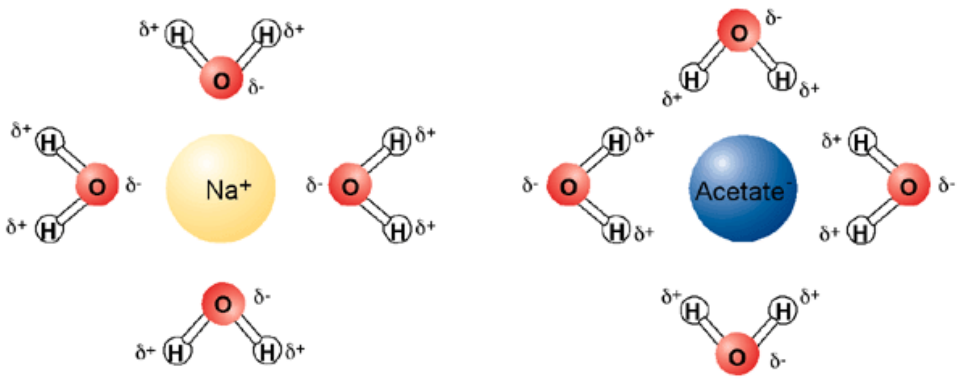
- Water, a strong dipole, has a high **dielectric constant.** As described quantitatively by Coulomb's law, the strength of interaction between oppositely charged particles is inversely proportionate to the dielectric constant of the surrounding medium.

ثابت العزل الكهربائي للفراغ هو الوحدة؛ وبالنسبة للماء هو 78.5. لذلك يقلل الماء بشكل كبير من قوة الجذب بين الأنواع المشحونة والقطبية بالنسبة للبيئات الخالية من المياه مع ثوابت العزل الكهربائي المنخفضة.

- The dielectric constant for a vacuum is unity; and for water it is 78.5. Water therefore greatly decreases the force of attraction between charged and polar species relative to water-free environments with lower dielectric constants.

يمكن ثنائي القطب القوي وثابت العزل الكهربائي العالي الماء من إذابة كميات كبيرة من المركبات المشحونة مثل الأملاح

- Its strong dipole and high dielectric constant enable water to dissolve large quantities of charged compounds such as salts



Water Molecules Form Hydrogen Bonds

نواة هيدروجين مرتبطة تساهميا بسحب الإلكترون يمكن أن تتفاعل ذرة الأكسجين أو النيتروجين مع زوج إلكترونات غير مشترك على ذرة أكسجين أو نيتروجين أخرى لتشكيل رابطة هيدروجينية.

- A hydrogen nucleus covalently bound to an electron-withdrawing oxygen or nitrogen atom can interact with an unshared electron pair on another oxygen or nitrogen atom to form a **hydrogen bond.**

يفضل الترابط الهيدروجيني الارتباط الذاتي لجزيئات الماء في صفائف مرتبة

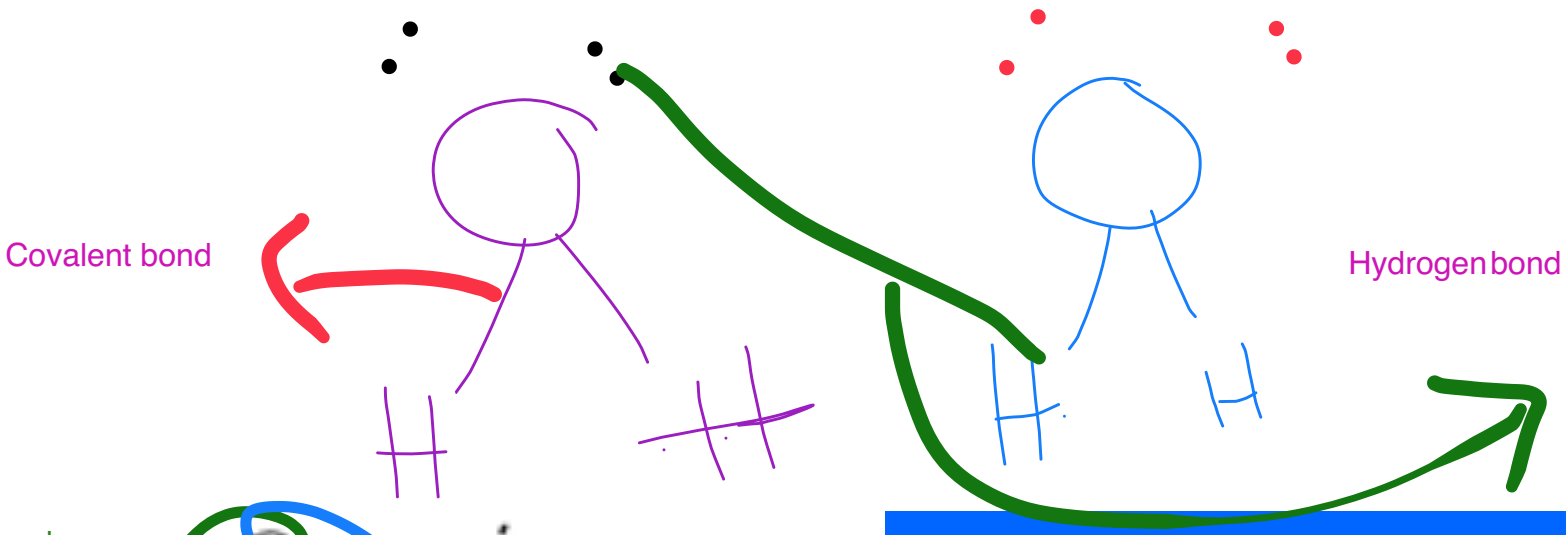
- Hydrogen bonding favors the self-association of water molecules into ordered arrays.

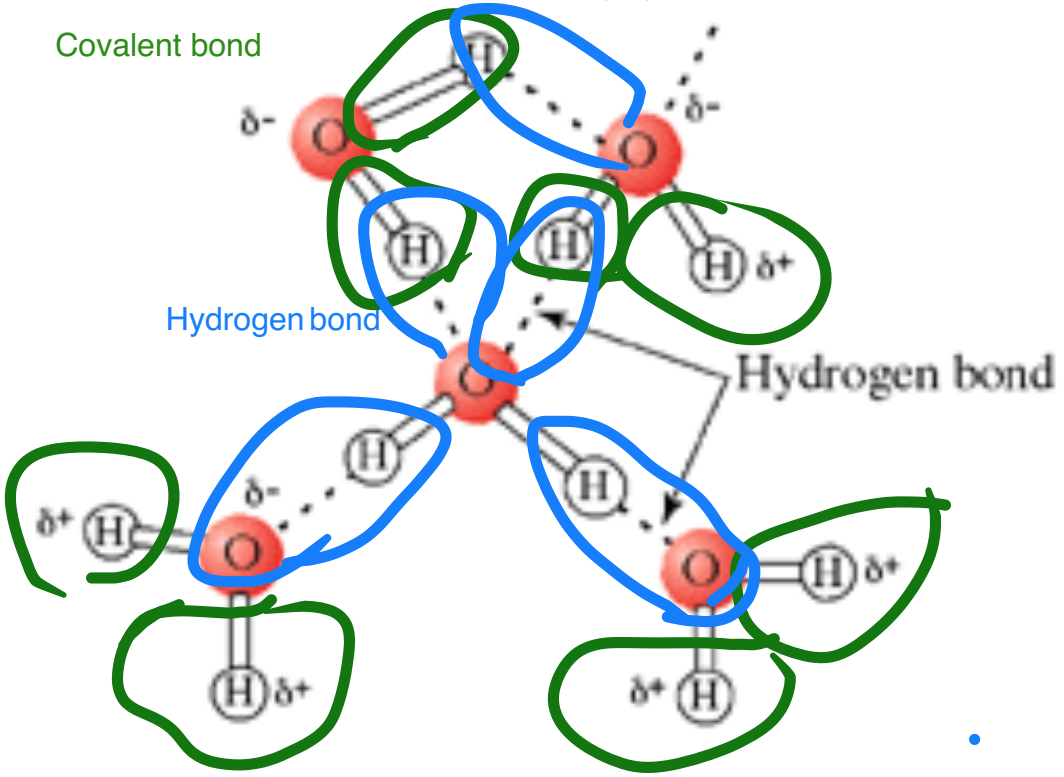
يؤثر الترابط الهيدروجيني على الخصائص الفيزيائية للماء و يمثل لزوجته العالية بشكل استثنائي، وتوتره السطحي، و نقطة الغليان.

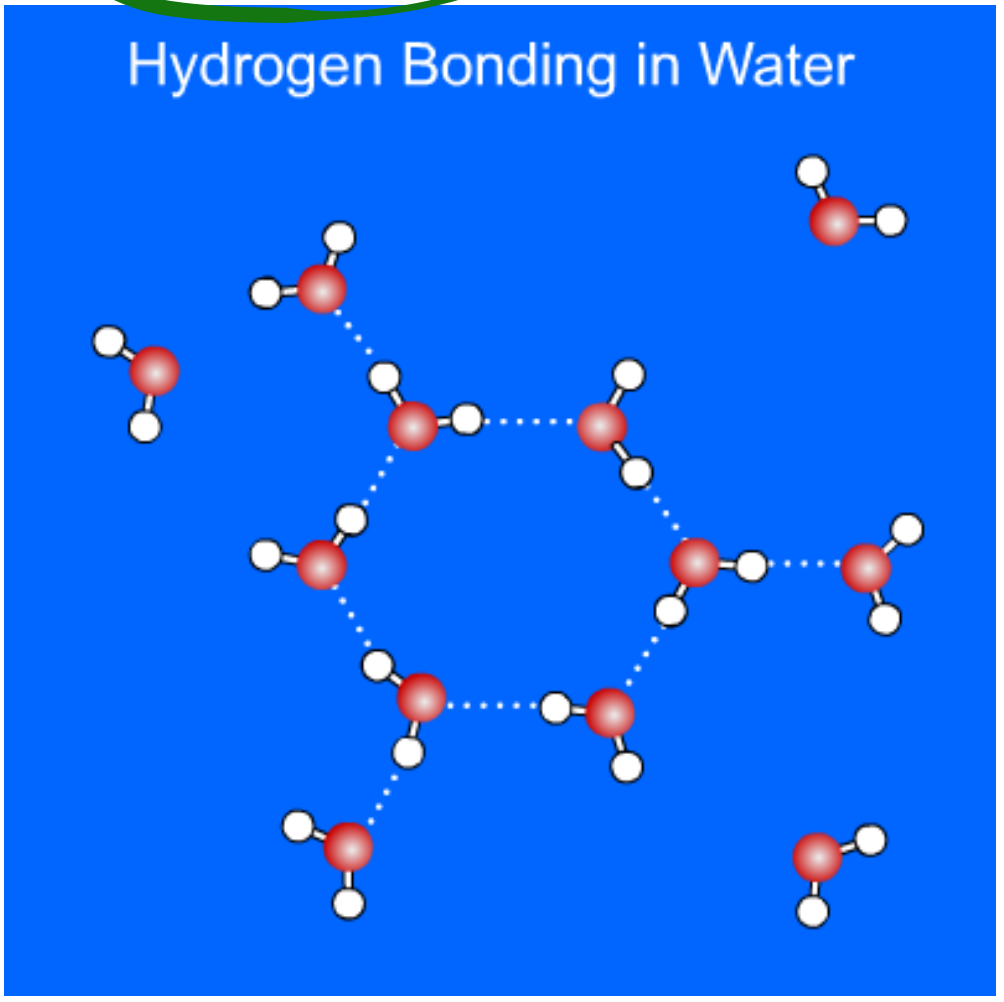
- Hydrogen bonding influences the physical properties of water and accounts for its exceptionally high viscosity, surface tension, and boiling point.

هذه الروابط ضعيفة نسبيا وعابرة، مع نصف عمر حوالي ميكروثانية واحدة. تمزق رابطة الهيدروجين في السائل يتطلب الماء حوالي 4.5 سعرة حرارية/مول فقط، أي أقل من 5٪ من الطاقة مطلوب لتمزق رابطة O-H التساهمية

- These bonds are both relatively weak and transient, with a half-life of about one microsecond. Rupture of a hydrogen bond in liquid water requires only about 4.5 kcal/mol, less than 5% of the energy required to rupture a covalent O-H bond.


Covalent bond
Hydrogen bond


Covalent bond
Hydrogen bond
Hydrogen bond


Hydrogen Bonding in Water

Water

Water Is an Excellent Nucleophile

غالبا ما تنطوي التفاعلات الأيضية على هجوم أزواج وحيدة من الإلكترونات على جزيئات غنية بالإلكترونات تسمى النيوكليوفيلات على الذرات الفقيرة للإلكترون تسمى الإلكتروفيلات. النوكليوفيلات و لا تمتلك الإلكتروفيلات بالضرورة سلبيا رسميا أو شحنة موجبة.

- Metabolic reactions often involve the attack by lone pairs of electrons on electron-rich molecules termed **nucleophiles** on electron-poor atoms called **electrophiles.** Nucleophiles and electrophiles do not necessarily possess a formal negative or positive charge.

اجت في الامتحان حرفي

partial يعني

الماء، الذي يحمل زوجان وحيدان من الإلكترونات سالباً جزئيا المسؤول، هو محب للنواة ممتاز.

- Water, whose two lone pairs of electrons bear a partial negative charge, is an excellent nucleophile.

تشمل النيوكليوفيلات الأخرى ذات الأهمية البيولوجية ذرات الأكسجين من الفوسفات والكحول والأحماض الكربوكسيلية؛ كبريت الثيول؛ نيتروجين الأمينات؛ وحلقة الإيميدازول من الهستيدين.

اجت في الامتحان

- Other nucleophiles of biologic importance include the oxygen atoms of phosphates, alcohols, and carboxylic acids; the sulfur of thiols; the nitrogen of amines; and the imidazole ring of histidine.

- Common electrophiles include the carbonyl carbons in amides, esters, aldehydes, and ketones and the phosphorus atoms of phosphoesters.

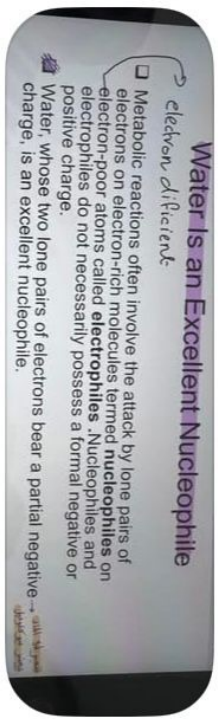
تشمل الإلكتروفيلات الشائعة كربونات الكربونيل في الأميدات،

الإسترات والألدهيدات والكيتونات وذرات الفوسفور

فوسفوسترز.

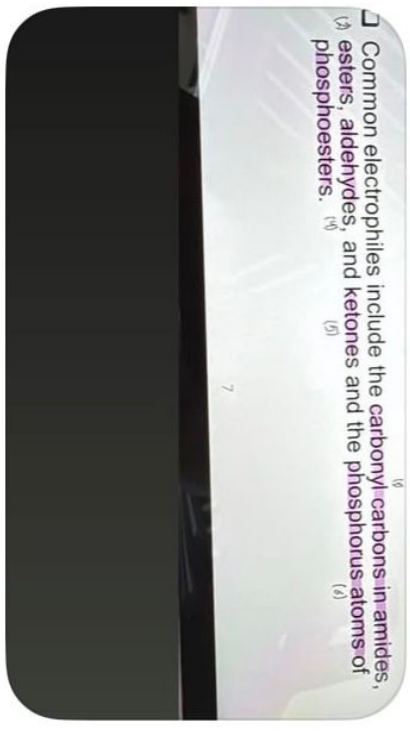
اسئلة سنوات لدفع يلي
قبلنا عن هدا السلايد

هاي احفظوها حرفي جابتها



Reply

هون جابت انه مجموعة الأمين في الamide و كانت غلط



Reply

يؤدي الهجوم النووي بواسطة الماء بشكل عام إلى انشقاق

روابط أميد أو جليكوزيد أو استر تجمع البوليمرات الحيوية معا.

تسمى هذه العملية بالتحلل المائي.

- Nucleophilic attack by water generally results in the cleavage of the amide, glycoside, or ester bonds that hold biopolymers together. This process is termed **hydrolysis.**

Reactant
water

- Conversely, when monomer units are joined together to form biopolymers such as proteins or glycogen, water is a product

Dehydration

على العكس من ذلك، عندما يتم ضم وحدات المونومر معا لتشكيل

البوليمرات الحيوية مثل البروتينات أو الجليكوجين، الماء هو منتج

Water Molecules Exhibit a Slight But Important Tendency to Dissociate

تعد قدرة الماء على التأين ذات أهمية مركزية للحياة.

- The ability of water to ionize, is of central importance for life.

- Water can act both as an acid and as a base, its ionization may be represented as an intermolecular proton transfer that forms a hydronium ion (H3O+)and a hydroxide ion (OH-)

يتفكك

يمكن أن يعمل الماء كحمض وكقاعدة، وقد يكون تأينه يمثل نقل البروتون بين الجزيئات الذي يشكل أيون الهيدرونيوم (+H3O) وأيون الهيدروكسيد (-OH)

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

- The transferred proton is actually associated with a cluster of water molecules. Protons exist in solution not only as H3O+ but also as multimers such as H5O2+ and H7O3+

يرتبط البروتون المنقول في الواقع بمجموعة من المياه جزيئات. توجد البروتونات في المحلول ليس فقط ك H3O+ ولكن أيضا ك متعددات مثل H5O2+ وH7O3+

- Since hydronium and hydroxide ions continuously recombine to form water molecules, an *individual* hydrogen or oxygen cannot be stated to be present as an ion or as part of a water molecule. At one instant it is an ion; an instant later it is part of a molecule.

لاتوتفاعل بروح وبيجي

بما أن أيونات الهيدرونيوم والهيدروكسيد تتحد باستمرار إلى تشكل جزيئات الماء، لا يمكن أن يكون الهيدروجين أو الأكسجين الفردي ذكر أنه موجود كأيون أو كجزء من جزيء الماء. في الساعة الواحدة لحظة هو أيون؛ لحظة بعد ذلك هو جزء من جزيء.

Water Molecules Exhibit a Slight But Important Tendency to Dissociate

تساهم أيونات الهيدروجين وأيونات الهيدروكسيد بشكل كبير في خصائص الماء.

- Hydrogen ions and hydroxide ions contribute significantly to the properties of water.

- For dissociation of water

  Kw = [H3O+] [OH-]

حيث تشير الأقواس إلى التركيز المولي للأيونات، Kw هو

تفكك ثابت من الماء و

- where brackets indicates the molar conc. of ions, Kw is the dissociation constant of water and = 1x10-14 so

-log Kw = -log [H3O+] + -log [OH-]

14 = pH + pOH

- **pH Is the Negative Log of the Hydrogen Ion Concentration**

  pH = -log [H3O+]

Example: If the concentration of H3O+in solution is 1x10-7 calculate pH

pH = -log [H3O+]

= -log (1x10-7) = 7

pKa

تمتلك العديد من المواد الكيميائية الحيوية مجموعات وظيفية هي أحماض ضعيفة أو القواعد.

- Many biochemicals possess functional groups that are weak acids or bases.

مجموعات الكربوكسيل والمجموعات الأمينية وإسترات الفوسفات، التي يقع الانفصال الثاني ضمن النطاق الفسيولوجي، وهو موجود في البروتينات والأحماض النووية، ومعظم الإنزيمات المساعدة، ومعظم الوسطاء الأيضات

- Carboxyl groups, amino groups, and phosphate esters, whose second dissociation falls within the physiologic range, are present in proteins and nucleic acids, most coenzymes, and most intermediary metabolites.

مهم لفهم تأثير الرقم الهيدروجيني داخل الخلايا pKa
على البنية والنشاط البيولوجي.

- pKa is important for understanding the influence of intracellular pH on structure and biologic activity.

الفصل القائم على الشحنة مثل الرحلان الكهربائي والأيونات
من الأفضل أيضا فهم كروماتوغرافيا التبادل من حيث
سلوك الانفصال للمجموعات الوظيفية

- Charge-based separations such as electrophoresis and ion exchange chromatography also are best understood in terms of the dissociation behavior of functional groups.

نطلق على الأنواع البروتونية (على سبيل المثال، HA أو R-NH3+) الحمض و الأنواع غير
البروتونية (على سبيل المثال، A- أو R-NH2) قاعدتها المترافقة.

- We term the protonated species (eg, HA or R-NH3+) the **acid** and the unprotonated species (eg, A– or R-NH2) its **conjugate base.**

معادلة هندرسون هاسلبالش يصف سلوك الأحماض الضعيفة

The Henderson-Hasselbalch Equation Describes the Behavior of Weak Acids

احنا اصلا كانت عنا هيك المعادلة:

- For a weak acid:

HA ⇌ H+ + A-

$pH = pK_a + \log\left(\frac{\text{قاعدة مرافقة}}{\text{الحمض}}\right)$

$HA \rightarrow H^+ + A^-$

صارت زي هيك

$$\log \frac{\text{Ionized concentration}}{\text{Unionized concentration}} = \text{pH} - \text{p}K_a$$

- For a weak base:

$RNH_2 \rightarrow RNH_3^+ + OH$

RNH2 ⇌ RNH3+ + OH-

ركزي

القاعدة / الحمض المرافق

$$\log \frac{\text{Unionized concentration}}{\text{Ionized concentration}} = \text{pH} - \text{p}K_a$$

تعتمد قيم pKa على خصائص متوسط

Values of the pKa depend Properties of the Medium

↑ Pka
PH

قد يقوم الوسيط إما برفع أو خفض pKa اعتمادا على سواء كان الحمض غير المنفصل أو قاعدته المترافقة هو المشحون الأنواع.

- The medium may either raise or lower the p*K*a depending on whether the undissociated acid or its conjugate base is the charged species.

يمكن ملاحظة تأثير ثابت العزل الكهربائي على pKa عن طريق إضافة الإيثانول إلى الماء.

- The effect of dielectric constant on p*K*a may be observed by adding ethanol to water.

يزداد pKa لحمض الكربوكسيل، في حين أن الأمين ينخفض لأن الإيثانول يقلل من قدرة الماء على الذوبان نوع مشحون.

- The p*K*a of a carboxylic acid *increases, w*hereas that of an amine *decreases* because ethanol decreases the ability of water to solvate a charged species.

قيم pKa للمجموعات المنفصلة في المناطق الداخلية للبروتينات وبالتالي يتأثرون بشدة ببيئتهم المحلية، بما في ذلك وجود أو عدم وجود الماء.

- The p*K*a values of dissociating groups in the interiors of proteins thus are profoundly affected by their local environment, including the presence or absence of water.

Ka↑
pH↓

↑ pKa = -log Ka

اذا زادت Ka اذا تفاعل قوي pH قليلة

تأثير إضافة الإيثانول على pKa للأحماض الكربوكسيلية والأمينات

- **بالنسبة لحمض كربوكسيلي (مثل R-COOH)**

يتفكك الحمض ليعطي أيون الكربوكسيلات السالب $R\text{-}COO^-$ وأيون الهيدروجين H^+. هذه العملية تتطلب استقرار الأيونات المتكونة بواسطة المذيب. في الماء (ثابت عزل مرتفع)، تكون الأيونات مستقرة، مما يزيح الاتزان ناحية التأين. عند إضافة الإيثانول، يقل ثابت العزل، وتقل قدرة المذيب على إذابة الأيونات، فيزداد ميل الحمض للبقاء في صورته غير المتأينة (غير المشحونة). ونتيجة لذلك، **تزداد قيمة pKa** (أي يصبح الحمض أضعف، حيث يحتاج إلى وسط أعلى قاعدية ليتأين).

- **بالنسبة للأمين (مثل $R\text{-}NH_2$)**

الأمين يكتسب بروتونًا ليكون الأيون الموجب $R\text{-}NH_3^+$ (الحمض المرافق). هنا أيضًا، الأيون الموجب يحتاج إلى استقرار في المذيب. بانخفاض ثابت العزل (بإضافة الإيثانول)، يصبح الأيون $R\text{-}NH_3^+$ أقل استقرارًا، فيميل الاتزان ناحية القاعدة الحرة $R\text{-}NH_2$ غير المشحونة. هذا يعني أن **pKa للحمض المرافق ($R\text{-}NH_3^+$) ينخفض**، أي أن الحمض المرافق أصبح أقوى (يفقد البروتون بسهولة أكبر)، أو بعبارة أخرى، القاعدة ($R\text{-}NH_2$) أصبحت أضعف.

الامين : قاعدة بدها تفكك لحمضها المرافق المفروض
بس لانو الايثانول ثابت العزل ضعيف فاذا الامين
مابتقدر تفكك

خلينا نشرحها : انا بعرف انو ثابت العزل بتناسب تناسب
عكسي مع قوى تجاذب ذرات فاذا قل زادت قوى
التجاذب وهكذا في الايثانول ثابت العزل قليل فاذا قوى
تجاذب كبيرة فاذا اذا تكوين الايونات اصعب

PKa عالية
PH عالية
Ka قليلة
قوة الحمض قليلة

PH blood= 7.4

Question

احسب الرقم الهيدروجيني لمحلول 0.1 م من حمض الخليك، pKa = 4.76،
احسب النسبة المئوية للأشكال المتأينة والموحدة.

- Calculate the pH of 0.1 M solution of acetic acid, pKa = 4.76, calculate the percentage of ionized and unionized forms.

- Calculate the percetage of ionized and unionized for histidine in hemoglobin at physiological pH knowing that pKa for the side chain of histidine is 6.0. If the pH of blood decreased to 7.1, calculate the percent ionized.

احسب نسبة المتأين والمتحد للهستيدين في
الهيموغلوبين عند درجة الحموضة الفسيولوجية مع العلم أن pKa للسلسلة الجانبية
من الهستيدين هو 6.0. إذا انخفض الرقم الهيدروجيني للدم إلى 7.1، احسب
النسبة المئوية المتأينة.

السؤال الأول:

$pKa = 4.76$

$Ka = 10^{-4.76}$

$Ka = 1.74 \times 10^{-5}$ (1)

$HA \longrightarrow A^- + H^+$

$.1 - x \quad\quad x + x$

$Ka = \frac{x^2}{.1 - x}$

$1.74 \times 10^{-5} \times .1 = x^2$

$\sqrt{x^2} = \sqrt{1.74 \times 10^{-5}}$

$x = 1.32 \times 10^{-3}$ (2)

طريقة اسهل

$H^+ = \sqrt{Ka * C}$

$= \sqrt{1.74 \times 10^{-5} \times .1}$

$H^+ = 1.32 \times 10^{-3}$

$pH = -\log(1.32 \times 10^{-3})$

$pH = 2.88$ (3)

$pH = pka + \log\left(\frac{A^-}{HA}\right)$

$2.88 = 4.76 + \log\left(\frac{A^-}{HA}\right)$

$-1.88 = \log\left(\frac{A^-}{HA}\right)$

$\frac{A^-}{HA} = .0132$

$A^- : HA$

$.0132 : 1 \rightsquigarrow 1.0132$ = بنوخذ المجموع

$A^-(\text{ionized})\% = \frac{.0132}{1.0132} \times 100\% = 1.3\%$

Un ionized % = 98.7 %

السؤال الثاني:

Physiological pH = 7.4

$$pH = pKa + \log\left(\frac{A^-}{HA}\right)$$

$$7.4 = 6 + \log\left(\frac{A^-}{HA}\right)$$

$$\log\left(\frac{A^-}{HA}\right) = 1.4$$

$$\frac{A^-}{HA} = 25.12$$

A^- : HA

25.12 : 1 ⇝ 26.12 = المجموع

ionized % = 96.17 %

unionized % = 3.8 %

pH اذا قل

pH = 7.1

$$7.1 = 6 + \log\left(\frac{A^-}{HA}\right)$$

$$1.1 = \log\frac{A^-}{HA}$$

$$\frac{A^-}{HA} = 12.6$$

ionized % = 92.6 %

unionized % = 7.4 %

سبحانك اللهم و بحمدك لا إله إلا أنت نستغفرك و نتوب إليك