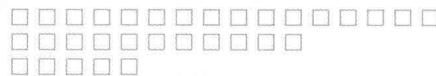
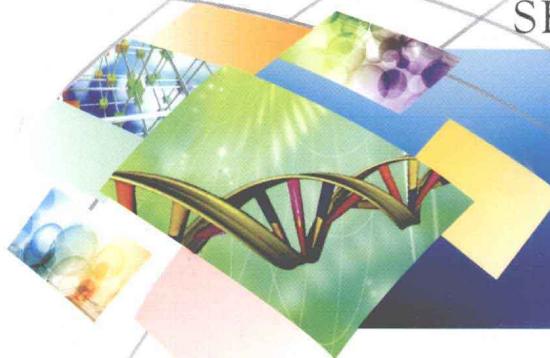




普通高等教育食品类专业“十二五”规划教材
高等学校食品类国家特色专业建设教材

食品生物化学

SHIPIN SHENGWU HUAXUE



陈晓平◎主编



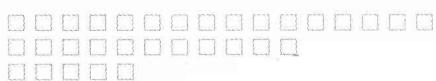
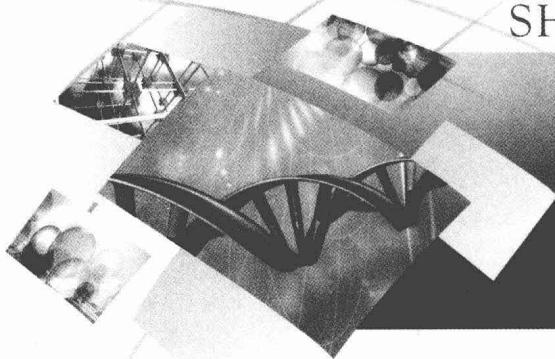
郑州大学出版社



普通高等教育食品类专业“十二五”规划教材
高等学校食品类国家特色专业建设教材

食品生物化学

SHIPIN SHENGWU HUAXUE



郑州大学出版社

内容提要

本书内容包括食品主要营养成分化学、食品加工储藏中的生物化学、物质代谢和能量代谢、现代食品生物化学实用技术等4个部分,共分10章。一方面强化作为教材需要学生掌握的基本理论,另一方面力求反映本领域的最新发展和动态,在内容上增加了一些物质代谢紊乱的典型案例,如糖尿病、脂肪肝等。由于现代食品生物化学与实践的结合越来越紧密,本书增加了现代食品生物化学实用技术等实用内容,力求满足多方面的需求。

本书可作为食品科学及其相关学科的各相关专业本科学生教材,亦可作为食品领域相关专业的各类研究生、科研和生产一线的科技人员的参考资料。

图书在版编目(CIP)数据

食品生物化学/陈晓平主编. —郑州:郑州大学

出版社,2011.2

(普通高等教育食品类专业规划教材)

ISBN 978-7-5645-0311-6

I. ①食… II. ①陈… III. ①食品化学:生物化学—
高等学校-教材 IV. ①TS201.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 235164 号

郑州大学出版社出版发行

郑州市大学路 40 号

邮政编码:450052

出版人:王 锋

发行部电话:0371-66966070

全国新华书店经销

郑州文华印务有限公司印制

开本:787 mm×1092 mm

1/16

印张:25.5

字数:622 千字

版次:2011 年 2 月第 1 版

印次:2011 年 2 月第 1 次印刷

书号:ISBN 978-7-5645-0311-6

定价:40.00 元

本书如有印装质量问题,由本社负责调换



编写指导委员会

(按姓氏笔画排序)

- 王茂增 河北工程大学农学院副教授
艾志录 河南农业大学食品科学技术学院教授
刘全德 徐州工程学院食品生物工程学院副教授
刘延奇 郑州轻工业学院食品与生物工程学院教授
孙俊良 河南科技学院食品学院教授
权伍荣 延边大学农学院食品科学系教授
张凤宽 吉林农业大学发展学院生物食品学院教授
张进忠 安阳工学院生物与食品工程学院教授
李新华 沈阳农业大学食品学院教授 博导
汪东风 中国海洋大学食品科学与工程学院教授 博导
肖安红 武汉工业学院食品科学与工程学院教授
邵秀芝 山东轻工业学院食品与生物工程学院教授
陆启玉 河南工业大学粮油食品学院教授 博导
陈从贵 合肥工业大学生物与食品工程学院教授
岳田利 西北农林科技大学食品科学与工程学院教授 博导
侯玉泽 河南科技大学食品与生物工程学院教授
胡耀辉 吉林农业大学食品科学与工程学院教授 博导
章超桦 广东海洋大学食品科技学院教授 博导
蔺毅峰 运城学院生命科学系教授
阚建全 西南大学食品科学学院教授 博导



主 编 陈晓平

副 主 编 鲁玉杰 曹泽虹
刘海英 王章存

编写人员 (按姓氏笔画排序)

王永敏 王章存 牛生洋
刘海英 陈晓平 陈海燕
赵云涛 徐文秀 郭金英
曹泽虹 崔敬爱 鲁玉杰
詹冬玲 蔡 敏



Food 序

近年来,我国高等教育事业快速发展,取得了举世瞩目的成就,为我国经济社会的快速、健康和可持续发展以及高等教育自身的改革发展做出了巨大贡献。但是,高等教育质量还不能完全适应经济社会发展的需要,迫切需要进一步深化高等学校教育教学改革,提高人才培养的能力和水平,更好地满足经济社会发展对高素质创新性人才的需要。为此,国家实施了高等学校本科教学质量与教学改革工程,进一步确立了人才培养是高等学校的的根本任务,质量是高等学校的命脉,教学工作是高等学校各项工作的中心的指导思想,把深化教育教学改革,全面提高高等教育教学质量放在了更加突出的位置。

专业建设、课程建设和教材建设是“质量工程”的重要组成部分,是提高高等教育教学质量的关键。“质量工程”实施以来,在专业建设、课程建设方面取得了明显的成果,而教材是这些成果的直接体现,同时也是深化教学内容和教学方法改革的重要推动力。为此,教育部要求加强新教材和立体化教材建设,提倡和鼓励学术水平高、教学经验丰富的教师,根据教学需要编写适应不同层次、不同类型院校,具有不同风格和特点的高质量教材。郑州大学出版社按照这样的要求和精神,在教育部食品科学与工程专业教学指导委员会的指导下,在全国范围内,对食品类专业的培养目标、规格标准、培养模式、课程体系、教学内容等,进行了广泛而深入的调研,在此基础上,组织全国二十余所学校召开了食品类专业教育教学研讨会、教材编写论证会,组织学术水平高、教学经验丰富的一线教师,吸收了近年来食品类专业教育教学经验和成果特别是各校特色专业建设成果,编写了本套系列教材。

教育教学改革是一个不断深化的过程,教材建设是一个不断推陈出新、反复锤炼的过程,希望这些教材的出版对食品类专业教育教学改革和提高教育教学质量起到积极的推动作用,也希望使用教材的师生多提意见和建议,以便及时修订、不断完善。

编写指导委员会
2010年11月



Food 前言

目前,《食品生物化学》教材版本较多,本教材力求取众家之长,一方面强化作为教材需要学生掌握的基本理论,另一方面力求反映本领域的最新发展和动态。

本书共分 10 章,主要内容包括食品中主要营养成分的化学,食品加工储藏中的生物化学、物质代谢和能量代谢,同时,本教材还增加了现代食品生物化学实用技术的部分内容。

本书由吉林农业大学、河南工业大学、徐州工程学院、许昌学院、郑州轻工业学院、武汉工业学院、山东轻工业学院、运城学院、河南科技大学、广东海洋大学、河南科技学院、安阳工学院等院校的教师共同编写。具体编写分工如下:

陈晓平(吉林农业大学)编写前言、第 1 章,徐文秀(运城学院)、郭金英(河南科技大学)、陈海燕(吉林农业大学发展学院)、王章存(郑州轻工业学院)、曹泽虹(徐州工程学院)、赵云涛(广东海洋大学)编写第 2 章,鲁玉杰(河南工业大学)编写第 3 章,牛生洋(河南科技学院)编写第 4 章,刘海英(许昌学院)编写第 5 章,蔡敏(安阳工学院)编写第 6 章,王永敏(山东轻工业学院)编写第 7 章、第 9 章,陈晓平、詹冬玲(吉林农业大学)、崔敬爱(吉林农业大学)编写第 8 章,赵云涛编写第 10 章。

本教材在编写过程中,采取编者互审、副主编分工审阅、主编审读的方式为书稿把关,充分体现团队的协作精神。同时,也得到了各编者所在单位领导和同仁的多方支持和帮助,谨此一并表示衷心感谢!

由于教材的内容较复杂和时间紧迫,加上我们水平有限,书中可能有欠妥之处,敬请广大师生和读者批评指正,以便修订。

陈晓平
2010 年 5 月于长春



Food

目录

| | |
|-------------------------------|-----|
| 第1章 绪论 | 1 |
| 1.1 生物化学的起源与发展 | 2 |
| 1.2 生物化学发展大事记 | 3 |
| 1.3 食品生物化学概念和内容 | 3 |
| 第2章 食品主要营养成分 | 4 |
| 2.1 水 | 5 |
| 2.2 糖类物质 | 20 |
| 2.3 脂类物质与生物膜 | 40 |
| 2.4 蛋白质 | 56 |
| 2.5 酶与维生素 | 83 |
| 2.6 核酸 | 109 |
| 第3章 食品加工储藏中的生物化学 | 128 |
| 3.1 蛋白质的功能特性及其在食品加工中的应用 | 129 |
| 3.2 食品的变色作用 | 141 |
| 3.3 采后植物性原料的代谢活动 | 150 |
| 3.4 宰后动物组织的生物化学 | 152 |
| 3.5 风味物质形成的生物化学 | 156 |
| 第4章 生物氧化 | 163 |
| 4.1 生物氧化概述 | 164 |
| 4.2 呼吸链 | 170 |
| 4.3 氧化磷酸化 | 175 |
| 4.4 其他末端氧化酶系统 | 184 |
| 第5章 糖类代谢 | 187 |
| 5.1 糖和糖代谢与生命活动的关系 | 188 |
| 5.2 糖的分解代谢 | 188 |
| 5.3 糖的合成代谢 | 207 |
| 5.4 糖代谢各途径之间的关系 | 214 |
| 5.5 糖代谢紊乱 | 215 |

| | |
|---------------------------------|-----|
| 第6章 脂类代谢 | 217 |
| 6.1 脂类的消化与吸收 | 218 |
| 6.2 甘油三酯代谢 | 218 |
| 6.3 磷脂的代谢 | 229 |
| 6.4 胆固醇代谢 | 235 |
| 6.5 血浆脂蛋白代谢 | 239 |
| 6.6 脂类代谢调节与脂类代谢紊乱 | 244 |
| 第7章 氨基酸代谢 | 246 |
| 7.1 蛋白质的降解 | 247 |
| 7.2 氨基酸主要代谢途径概述 | 249 |
| 7.3 氨基酸的分解代谢 | 250 |
| 7.4 氨基酸的合成代谢 | 266 |
| 第8章 核酸代谢与蛋白质生物合成 | 279 |
| 8.1 核酸的分解代谢 | 280 |
| 8.2 核苷酸的合成代谢 | 285 |
| 8.3 脱氧核糖核苷酸的合成 | 291 |
| 8.4 核苷二磷酸和核苷三磷酸的合成 | 293 |
| 8.5 核酸的生物合成 | 294 |
| 8.6 蛋白质的生物合成 | 324 |
| 第9章 代谢相互关系与调控 | 353 |
| 9.1 生物体内的物质代谢的特点 | 354 |
| 9.2 代谢途径的相互联系 | 355 |
| 9.3 器官间的代谢联系 | 357 |
| 9.4 代谢调节 | 359 |
| 第10章 现代食品生物化学实用技术 | 376 |
| 10.1 生物传感器分析技术及其在食品科学中的应用 | 377 |
| 10.2 免疫分析技术及其在食品中的应用 | 381 |
| 10.3 基因分析技术及其在食品中的应用 | 389 |
| 参考文献 | 399 |



生物化学是研究生命现象化学本质的科学。它的宗旨是在分子水平上探讨生命的本质，研究生物体的分子结构与功能、物质代谢与调节及其在生命活动中的规律与特点。

第 1 章

绪 论

1.1 生物化学的起源与发展

生物化学这一名词的出现大约在 19 世纪末 20 世纪初,但它的起源可追溯得更远,其早期的历史是生理学和化学早期历史的一部分。例如 18 世纪 80 年代,拉瓦锡(Attoine Laurent Lavoisier,1743~1794)证明呼吸与燃烧一样是氧化作用,几乎同时,科学家又发现光合作用本质上是动物呼吸的逆过程。又如 1828 年沃勒(Waller)首次在实验室中合成了一种有机物——尿素,打破了有机物只能靠生物产生的观点,给“生机论”以重大打击。1860 年巴斯德(Pasteur)证明发酵是由微生物引起的,但他认为必须有活的酵母才能引起发酵。1897 年毕希纳(Buchner)兄弟发现酵母的无细胞抽提液可进行发酵,证明没有活细胞也可进行如发酵这样复杂的生命活动,终于推翻了“生机论”。

生物化学的发展大体可分为 3 个阶段:

(1) 静态生物化学时期(19 世纪末~20 世纪 30 年代) 此时期研究内容以分析生物体内物质的化学组成、性质和含量为主,对生物体各种组成成分进行分离、纯化、结构测定、合成及理化性质的研究。其中菲舍尔(Fischer)测定了很多糖和氨基酸的结构,确定了糖的构型,并指出蛋白质是肽键连接的。1926 年萨姆纳(Sumner)制得了脲酶结晶,并证明它是蛋白质。

此后四五年间,诺思罗普(Northrop)等人连续结晶了几种水解蛋白质的酶,指出它们都无例外地是蛋白质,确立了酶是蛋白质这一概念。通过食物的分析和营养的研究发现了一系列维生素,并阐明了它们的结构。

与此同时,人们又认识到另一类数量少而作用重大的物质——激素。它和维生素不同,不依赖外界供给,而由动物自身产生并在自身中发挥作用。肾上腺素、胰岛素及肾上腺皮质所含的甾体激素都在这一阶段发现。此外,中国生物化学家吴宪在 1931 年提出了蛋白质变性的概念。

(2) 动态生物化学时期(20 世纪 30~50 年代) 这是一个飞速发展的辉煌时期。主要特点是研究生物体内物质的变化,即代谢途径,所以称动态生化阶段。其间突出成就是确定了糖酵解、三羧酸循环以及脂肪分解等重要的分解代谢途径。对呼吸、光合作用以及腺苷三磷酸(ATP)在能量转换中的关键位置有了较深入的认识。

当然,这种阶段的划分是相对的。对生物合成途径的认识要晚得多,在 20 世纪 50~60 年代才阐明了氨基酸、嘌呤、嘧啶及脂肪酸等的生物合成途径。

(3) 机能生物化学时期(20 世纪 50 年代~现在) 此时期是真正意义上的现代的生命化学,主要特点是研究生物大分子的结构与功能。生物化学在这一阶段的发展,以及物理学、技术科学、微生物学、遗传学、细胞学等其他学科的渗透,产生了分子生物学,并成为生物化学的主体。蛋白质化学和核酸化学成为研究重点。

生物化学研究深入到生命的本质和奥秘:运动、神经、内分泌、生长、发育、繁殖等的分子机制。



1.2 生物化学发展大事记

1776~1778年,瑞典化学家舍勒(Sheele)从天然产物中分离出甘油、苹果酸、柠檬酸、尿酸、酒石酸等。

1937年,英国生物化学家克雷布斯(Krebs)发现三羧酸循环,获1953年诺贝尔生理学奖。

1953年,沃森-克里克(Watson-Crick)确定DNA双螺旋结构,奠定了现代分子生物学的基础,从此,核酸成了生物化学研究的热点和重心,获1962年诺贝尔生理、医学奖。

1955年,英国生物化学家桑格尔(Sanger)确定牛胰岛素结构,获1958年诺贝尔化学奖。

1980年,桑格尔和吉尔伯特(Gilbert)设计出测定DNA序列的方法,获1980年诺贝尔化学奖。

1983年,Karg B. Mallis(美)发明PCR方法。

1984年,诺贝尔化学奖,Bruce Merrifield(美国),建立和发展蛋白质化学合成方法。

1994年,诺贝尔生理、医学奖,Alfred G. Gilman(美国),发现G蛋白及其在细胞内信号传导中的作用。

1996年,Petr c. Doherty(美)等,发现T细胞对病毒感染细胞的识别和MHC(主要组织相容性复合体)限制。

1998年,Rolert F. Furchgott(美国),发现NO是心血管系统的信号分子。

1.3 食品生物化学概念和内容

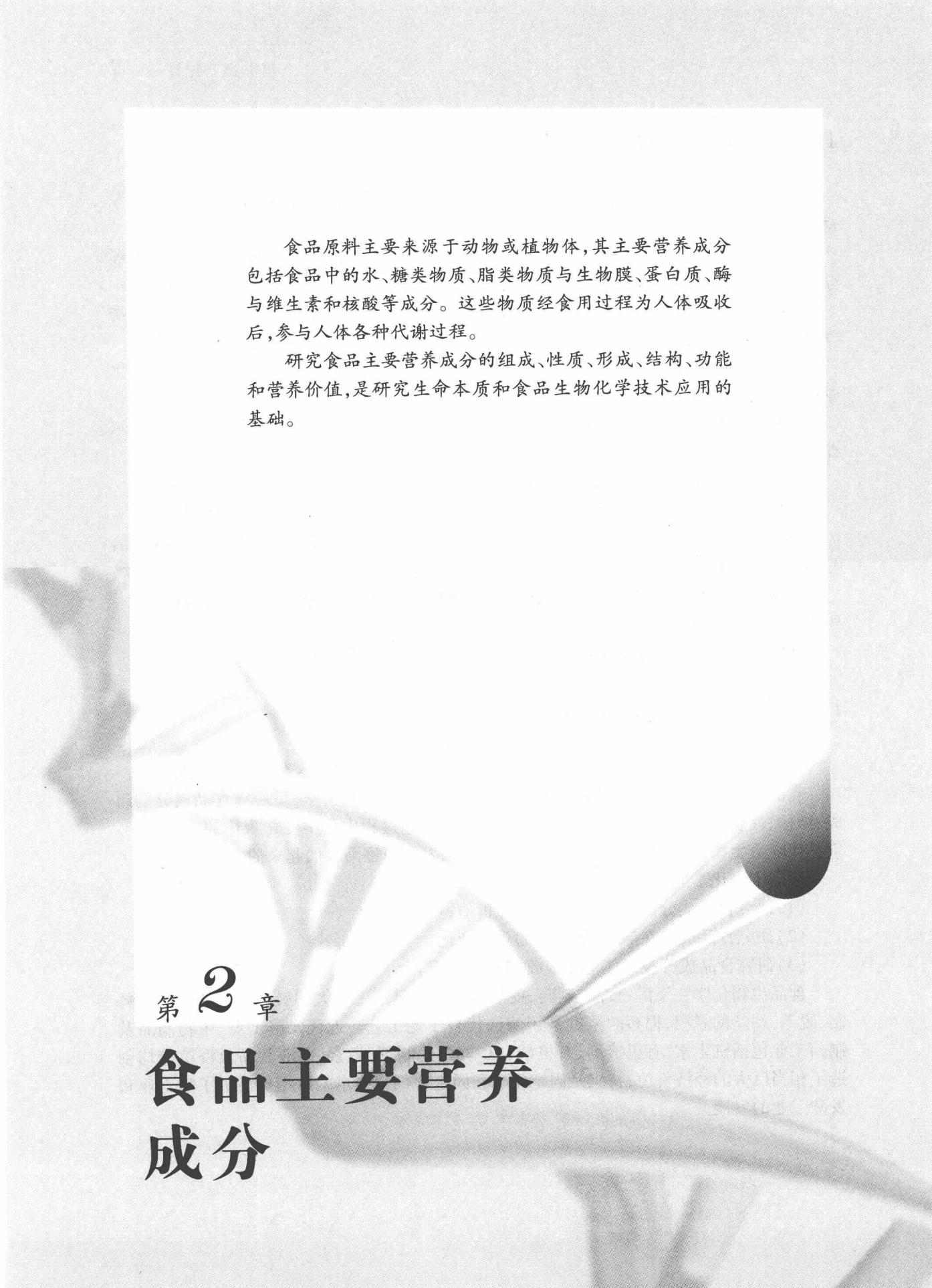
食品是人类为维持正常生理功能,不以治疗为目的而食用的含有营养素的物质。

食品生物化学是食品化学和生物化学融合而形成的新兴科学,是研究食品成分的组成、结构、性质、形成、食品储藏和加工及在人体内代谢过程中化学变化规律的一门科学。它是伴随着生物化学和食品化学以及食品科学的发展而逐渐发展起来的。

食品生物化学的基本内容:

- (1)研究食品成分的结构、性质和营养价值;
- (2)研究食品成分在储藏、加工中的化学变化;
- (3)研究食品成分被人体消化吸收和转化利用。

食品生物化学在发酵、食品、制药、皮革等行业都显示了强大的威力。例如皮革的鞣制、脱毛,蚕丝的脱胶,棉布的浆纱都用酶法代替了老工艺。近代发酵工业、生物制品及制药工业包括抗生素、有机溶剂、有机酸、氨基酸、酶制剂、激素、血液制品及疫苗等均创造了相当巨大的经济价值,特别是固定化酶和固定化细胞技术的应用更促进了酶工业和发酵工业的发展。



食品原料主要来源于动物或植物体,其主要营养成分包括食品中的水、糖类物质、脂类物质与生物膜、蛋白质、酶与维生素和核酸等成分。这些物质经食用过程为人体吸收后,参与人体各种代谢过程。

研究食品主要营养成分的组成、性质、形成、结构、功能和营养价值,是研究生命本质和食品生物化学技术应用的基础。

第 2 章

食品主要营养成分



2.1 水

食品的基本成分包括蛋白质、碳水化合物、脂类、维生素、矿物质和水等。其中，水是最普遍的一个组成成分。在大多数食品中，水分的质量分数超过任何一种物质成分，通常占食品总质量的 50%~90%。不同食品有其特定的水分质量分数。

主要食品的水分质量分数如表 2.1 所示。

表 2.1 主要食品的水分质量分数

| 食品 | 水分质量分数 | 食品 | 水分质量分数 |
|------------|---------|--------------|---------|
| 乳制品 | | 高脂食品 | |
| 奶油 | 15% | 人造奶油 | 15% |
| 切达乳酪 | 40% | 蛋黄酱 | 15% |
| 酪农乳酪 | 75% | 纯油和脂肪 | 0 |
| 鲜奶油 | 60%~70% | 沙拉酱 | 40% |
| 乳粉 | 4% | 谷物和谷物产品 | |
| 液体乳制品 | 87%~91% | 早餐谷物 | <4% |
| 冰淇淋和冰糕 | 65% | 通心粉 | 9% |
| 水果和蔬菜 | | 面粉、粗燕麦粉、粗面粉 | 10%~13% |
| 鳄梨 | 65% | 全粒谷物 | 10%~12% |
| 豆(青刀豆、利马豆) | 67% | 面包 | 35%~45% |
| 浆果 | 81%~90% | 饼干和椒盐卷饼 | 5%~8% |
| 柑橘 | 86%~89% | 馅饼 | 43%~59% |
| 黄瓜 | 96% | 坚果类 | |
| 干水果 | ≤25% | 成熟生坚果 | 3%~5% |
| 新鲜水果(可食部分) | 90% | 新鲜栗子 | 53% |
| 新鲜水果、果汁和果蜜 | 85%~93% | 肉、蛋、水产和家禽产品 | |
| 番石榴 | 81% | 动物肉和水产 | 50%~85% |
| 豆类(干) | 10%~12% | 新鲜蛋 | 74% |
| 甜瓜 | 92%~94% | 干蛋 | 5% |
| 成熟橄榄 | 72%~75% | 鹅 | 50% |
| 根茎 | | 鸡 | 75% |
| 白皮马铃薯 | 78% | 糖和以糖为基本原料的产品 | |
| 红薯 | 69% | 蜂蜜和其他糖浆 | 20%~40% |
| 小萝卜 | 93% | 果冻、果酱和柑皮果冻 | ≤35% |
| 芹菜、萝卜 | 79% | 白糖、硬糖、纯巧克力 | ≤1% |

6 食品生物化学

食品是多种成分构成的复杂体系。在食品中,水与其他成分相互作用,以不同的形式存在,对食品的新鲜度、硬度、流动性、呈味性、保藏性和加工性等具有重要的影响。

食品加工过程中,人们通过干燥、增加食盐或糖的浓度,冷冻(目的是降低水的含量及活性),有效抑制很多不良反应的发生和微生物的生长,延长食品保藏期。但是,这些处理过程中,水与食品中大分子物质作用方式发生改变,食品的固有特征发生很大的变化。无论采用何种方式,加工过的食品很难恢复到原来状态,主要原因是这些食品中的水很难恢复到原来的状态。因此,有必要对水和冰的特性进行研究,以控制水在食品加工储藏过程中的变化和影响。

2.1.1 水和冰的结构与特性

2.1.1.1 单分子水的结构

水的化学式为 H_2O 。从分子结构来看,水分子中氧的 6 个价电子参与杂化,形成 4 个 sp^3 杂化轨道,两个氢原子接近氧的两个 sp^3 成键轨道结合成两个 σ 共价键(成键电子对),每个 σ 键的离解能约为 461.4 kJ/mol。氧的两个定域分子轨道(未成键电子对)绕着原有的轨道轴保持对称定向,形成一个近似四面体的结构。图 2.1(a) 和(b) 分别表示水分子的轨道模型和范德华半径。

水蒸气中水多以单分子形式存在,在此状态下,单个水分子的键角由于受到了氧的未成键电子对的排斥作用,键角压缩为 104.5° (所以具有 V 型结构),接近完美的四面体角度 $109^\circ 28'$, O—H 核间距离为 0.096 nm, 氧和氢原子的范德华半径分别为 0.14 nm 和 0.12 nm。

必须指出:纯水中不仅含有普通的 H_2O 分子,而且还含有许多其他成分,除了普通的 ^{16}O 和 1H 外,还存在 ^{17}O 、 ^{18}O 、 2H 和 3H ,形成 18 种 HOH 同位素变异数。水中也含有离子,如氢离子(以 H_3O^+ 形式存在)和氢氧根离子(OH^-)及其他们的同位素变异数。因此纯水中含有 33 种以上的 HOH 化学变异数,但这些变异数仅少量存在于水中,大多数情况下可以忽略不计。

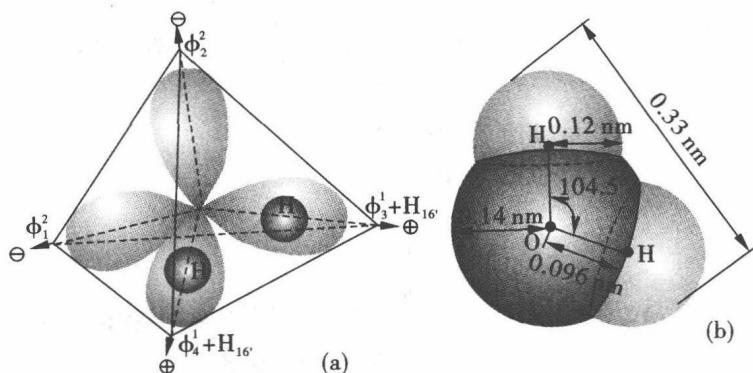


图 2.1 单个水分结构示意图

2.1.1.2 液态水的结构

常温下,水不是以单分子形式存在,而是若干个水分子缔合,以水分子簇形式存在。这是因为 HOH 分子呈 V 字样的形状,这种结构使水分子正负电荷向两端集中,一端为两个 H 离子带正电荷,一端为 O 带负电荷,造成不对称的电荷分布,使 O—H 键具有极性。由于静电引力形成氢键,使水分子产生了分子间的吸引力,因而水分子具有强烈的缔合倾向。

氢键是与大的原子 X(氟、氧、氮等)共价结合的氢,与负电性大的原子 Y(与 X 相同的也可以)接近,在 X 与 Y 之间以氢为媒介,生成“X—H…Y”型的键。这种键称为氢键。

与共价键(平均键能约 335 kJ/mol)相比,氢键是弱键(一般为 2~40 kJ/mol),它的键长较长,而且长短不一。O…H 键的解离能为 13~25 kJ/mol。因此,缔合体的结构是不稳定的,缔合体包括的 H₂O 单体数目也多种多样,并且不断变动,这些缔合体之间通过水分子的得失在一定条件下处于动态平衡。

缔合体的结构模型参见图 2.2。每个水分子具有数量相等的氢键给体与氢键接受体,能够在三维空间形成氢键,所以每个水分子能与 4 个其他水分子形成氢键(即配位数为 4),由此而形成四面体排列。

水可以在三维空间形成氢键,为水许多异常性质提供了一个合理的解释。例如:水具有高的热容量、熔点、沸点、表面张力和相变热,这些都与打破分子间的氢键所需的额外能量有关。水的介电常数也受氢键的影响。虽然水分子是一个偶极子,然而远远不足以解释水的高介电常数。通过氢键结合的水分子簇产生多分子偶极,有效地提高了水的介电常数。

氢键的键合程度与温度有关。0 ℃时,冰中水分子的配位数是 4.0,随着温度增加,水的配位数增大。在 1.5 ℃时,水的配位数是 4.4;在 83 ℃时,水的配位数是 4.9。最邻近的水分子间距离从 0 ℃(冰)时的 0.276 nm 分别增加到 1.5 ℃的 0.29 nm 和 83 ℃的 0.305 nm。

冰向水转变时,伴随着最邻近的水分子间距离的增加(密度变小)与最邻近水分子的平均数增加,即配位数增加(密度变大)。在 0~3.98 ℃之间,配位数增加的效应占优势,而在 3.98 ℃以上,最邻近的水分子之间的距离增加的效应占优势,所以造成人们所熟知的 3.98 ℃时,水的密度最大。

水的低黏度与水的结构有关。水分子的氢键排列不是固定不变的,在 10⁻⁹~10⁻¹² s 的时间间隔内,水分子改变与它相邻分子的氢键关系,于是增加了分子的流动性,降低了水的黏度。

虽然液态水易流动,不能形成刚性结构,但是,比起蒸汽状态的水分子,结构化程度要高很多。一个水分子的取向和运动受它邻近水分子的影响,纯水的结构是一个非常复杂的问题。目前,提出了三种结构模型:混合结构模型、填隙结构模型和连续(也称为均一)结构模型。

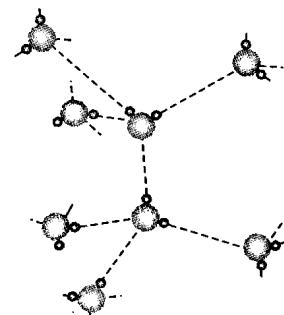


图 2.2 水分子通过氢键形成四面体构型

混合模型体现了分子间氢键的概念。由于水分子间氢键相互作用,它们短暂聚集成由3、4、5或8聚体等构成的庞大水分子簇。这些水分子簇与其他更紧密的分子处于动态平衡(水分子簇的瞬间寿命约为 10^{-11} s)。

连续结构模型认为:分子间的氢键均匀地分布在整个水体系中,当冰融化时,许多氢键发生扭曲。根据这个模型可以认为水分子的动态连续网络结构是存在的。

填隙结构模型:水保留了一个类似冰或者是“笼形”的结构,单个水分子填满整个笼的间隙空间。

以上三种模型主要的结构特征是:液态水中主要作用力是氢键,氢键快速地生成和破坏。具体而言:液态水以短暂的氢键缔合形成扭曲的四面体结构。在所有这些模型中,各个水分子通过快速地终止一个氢键代之以形成一个新的氢键的方式频繁地变更它们的结合及排列。温度恒定的条件下,虽然氢键快速地生成和破坏,但整个体系的氢键和结构保持不变。

2.1.1.3 冰的结构

冰是水分子有序排列形成的晶体,是水分子依靠氢键连接构成的非常“疏松”的刚性结构。在冰中,O—O核间最邻近的距离为0.276 nm。O—O—O键角约 109° ,非常接近完美的四面体角 $109^\circ28'$,在此结构中,每一个水分子能同最邻近的4个水分子缔合(配位数4),形成四面体结构。如图2.3。

当几个晶胞结合在一起形成晶胞群时,从顶部(沿着平行C轴的方向向下)观察,可以清楚地观察到冰的正六方形结构。如图2.4(a)所示。如果从三维角度观察左图,可得到图2.4(b)的结果:冰结构中存在两个平面(由空心和实心的圆分别表示),这两个平面平行并且紧密的结合在一起,它们是构成冰的“基本平面”。许多平面的堆积就构成了冰的结构(图2.5)。

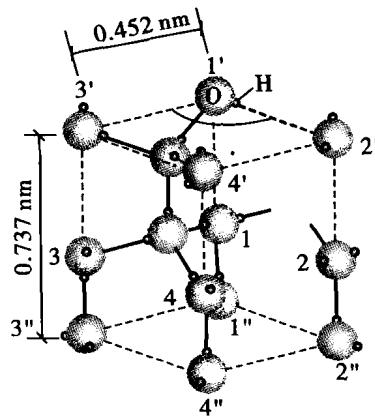


图2.3 0℃时普通冰的晶胞

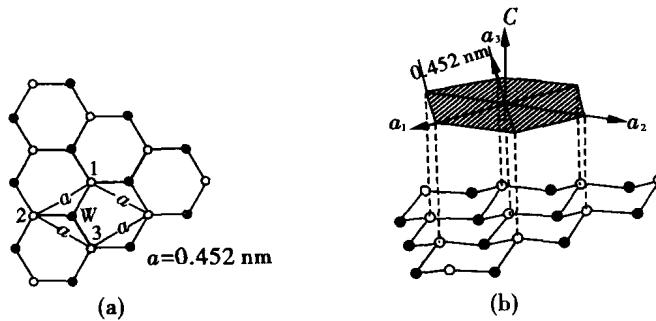


图2.4 冰的“基本平面”

(a)从C轴所观察到的正六边形结构;(b)基本平面的三维图
(圆圈代表水分子的氧原子,○●分别代表基本平面上层和下层的氧原子)