

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Karel Vacek

Voda - známá neznámá

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 42 (1997), No. 3, 134--143

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/139768>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1997

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

Voda — známá neznámá

Karel Vacek, Praha

Motto:

Vodo!

Vodo, nemáš ani chuť, ani barvu, ani vůni, nelze tě popsat; vychutnávají tě, aniž vědí, co jsi! Nedá se říci, že jsi nezbytná pro život: ty jsi sama život. Naplňuješ nás radostí, která se nedá vysvětlit našimi pocity.

Ty jsi největší bohatství na světě...

A. Saint-Exupéry

Voda je spolu se vzduchem, který dýcháme, nejvzácnějším dědictvím lidstva. S vodou se setkáváme v kosmu. Ale v kosmickém prostoru existuje jen ve formě ledu a páry. Dosud je to pouze Země, kde ji nacházíme v kapalném stavu. Deště, sněh, vodní toky a vypařování jsou známé etapy vodního cyklu. Detailní analýza pochodů probíhajících v atmosféře je dnes nezbytná pro výzkum hydrologických zdrojů našeho prostředí i předpovědi počasí. A k tomu všemu přistupuje dominantní úloha vody v životě lidí, živočichů a rostlin (fauny a flóry).

Vlastnosti vody se ostře odlišují od všech známých látek na Zemi. Mnohé zvláštnosti vody se vysvětlují osobitou stavbou její molekuly, nejmenší z tříatomových molekul. Elektronová konfigurace molekul vody je základem jejích strukturních útvarů; ty vznikají intermolekulárními interakcemi, které se uskutečňují vodíkovými můstky. Tyto můstky jsou odpovědné za prostorové rozložení molekul vody, jež ji činí kapalinou. Patrně ve struktuře prostorové sítě vodíkových můstků, vytvořených molekulami vody, se skrývá i příčina všech jejích anomálních vlastností.

Co je tedy příčinou toho, že voda hrála a hraje tak významnou roli v existenci naší planety a při vzniku a vývoji života na ní? Pokusme se hledat na tyto otázky odpovědi.

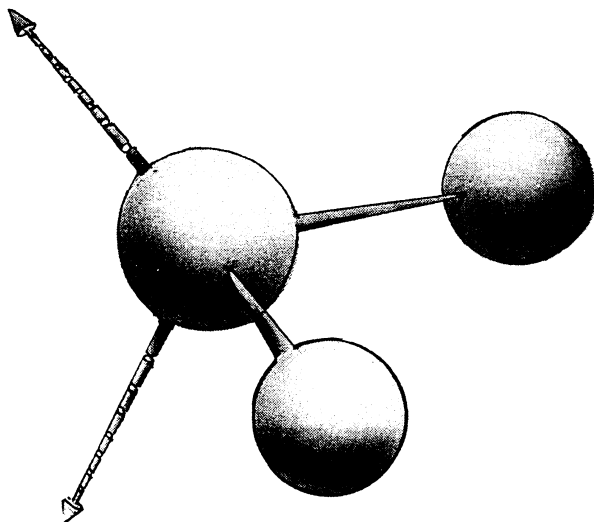
Struktura vody (experimentální fakta a modely)

Nepochybně příčinu (jak již bylo řečeno) všech významných fyzikálních i chemických vlastností vody je třeba hledat v její struktuře. Jaká jsou tedy dnes známá fakta, vážící se ke vlastnostem a struktuře vody.

Voda byla jedním ze čtyř „prvků“, které řecký filozof Aristoteles definoval spolu s ohněm, vzduchem a zemí jako základní konstituenty vesmíru. Přesto však ani dnes mezi nimi nepatří k nejlépe poznaným. Může se to zdát překvapující, neboť voda je pro nás zdánlivě familiární kapalinou. Oceány, jezera, řeky, vodní srážky se vyskytují téměř

Prof. RNDr. KAREL VACEK, DrSc. (1930), MFF UK, Praha.

všude na naší planetě, voda určuje z velké části krajinu a klima. Je často synonymem života a je skutečně hlavní složkou struktury a metabolismu všech živých bytostí. Tato počáteční biologická role vody není jistě náhodná, ale váže se na její výjimečné vlastnosti fyzikální a chemické. Příkladem vlastnosti vody biologicky velmi důležité je tzv. hydrofobní jev, tj. fakt, že uhlovodíkové seskupení C–H má tendenci být odpuzováno molekulami vody. Tento jev je v podstatě odpovědný, alespoň částečně, za komplexní prostorové struktury, které představují proteiny, DNA a lipidické dvojvrstvy buněčných membrán, jejichž struktury by se staly v nepřítomnosti vody nestabilními; dá se dokonce říci, aniž riskujeme omyl, že tento jev musel hrát určující roli při objevení se života na Zemi. Ale hydrofobní jev není jedinou zajímavou vlastností vody, jsou i další.

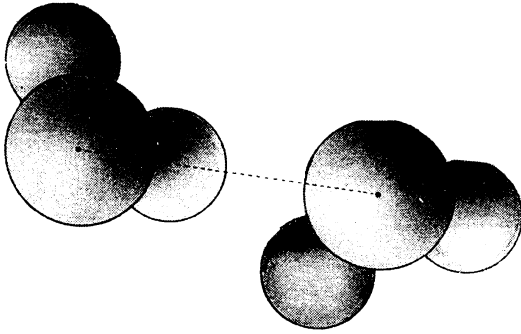


Obr. 1. Voda, tato mimořádná kapalina, je tvořena molekulami vody, jejichž geometrie je tetraedrická: dvě kovalentní vazby OH a dva volné elektronové páry (na obr. znázorněné 2 šipkami) kyslíkového atomu směřují do vrcholů tetraedru, jehož středem je kyslík.

V molekule H_2O je každý vodíkový atom vázán na kyslíkový atom tzv. kovalentní vazbou (obr. 1). Rozdělení elektronů v kovalentní vazbě O–H není však symetrické: elektrony jsou silněji přitahovány k atomu kyslíku než vodíku. Z toho vyplývá, že kyslík je nabit záporně a vodíkové atomy kladně. Tato nerovnováha v rozdělení elektrických nábojů, spojená s nelineární geometrií molekuly vody (obr. 1), se projevuje existencí silného elektrického momentu. Právě tato elektrická nerovnováha je z velké části odpovědná za velké rozpouštěcí schopnosti vody vůči iontovým krystalům, některým solím, kyselinám nebo zásadám. Ovšem klíč k pochopení vlastností vody vězí ve vazbách, které molekuly vody mohou vytvářet se svými sousedy.

Viděli jsme v molekule H_2O , že kyslíkový atom váže 8 valenčních elektronů, z nichž jen čtyři jsou zahrnuty do kovalentních vazeb O–H se dvěma vodíkovými atomy. Čtyři zbývající elektrony jsou seskupeny do dvou párů nazývaných volné elektrické dublety. Každý z těchto dubletů s negativním nábojem může vytvářet elektrostatickou vazbu s vodíkovým atomem kladně nabitým sousední molekuly vody (obr. 1); tím vzniká

vodíková vazba (vodíkový můstek), v níž kyslíkový atom molekuly a atomy skupiny H–O sousední molekuly (obr. 2) leží na přímce. Vodíkové můstky, které jsou stabilní za pokojové teploty, jsou přesto křehké ve srovnání s kovalentní vazbou; tím lze pochopit jejich důležitost např. v biochemických reakcích, při nichž potřebné energie jsou slabé!



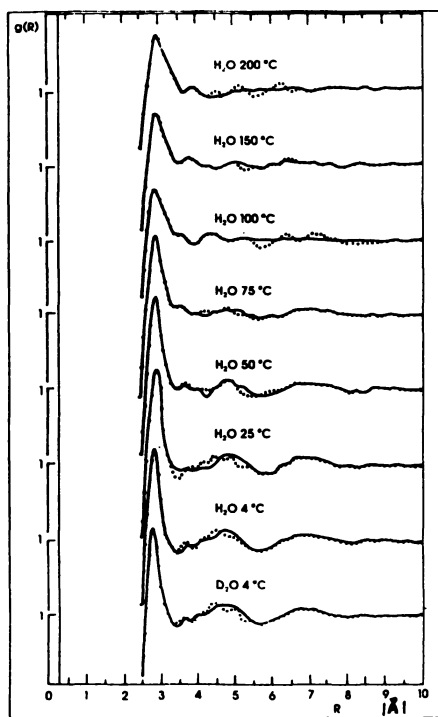
Obr. 2. Molekuly vody se mohou mezi sebou shlukovat díky elektrostatické podstatě vazeb nazývaných vodíkové můstky, jejichž role je určující pro vlastnosti vody. Vodíkový můstek může vzniknout mezi vodíkovým atomem jedné molekuly a kyslíkovým atomem sousední molekuly vody, při čemž atomy O–H...O leží na přímce.

Charakteristiky vody se z velké části odvíjejí z geometrie molekuly. V molekule vody geometrie vytvořená směry dvou kovalentních vazeb a dvěma elektrickými volnými dublety je velmi blízká tetraedru, v jehož středu se nachází kyslíkový atom. Tím tedy vznikne útvar, v ledu trvalý a ve vodě přechodný, v němž se kyslíkové atomy vody nacházejí ve vrcholcích kvazitetraedrické mřížky (obr. 1).

Jedna z nejkurióznějších vlastností vody se projevuje v tom, že led plave, pokud je ponořen do studené vody. Hustota vody se totiž s teplotou mezi 0°C a 4°C zvětšuje. Tuto pozoruhodnou vlastnost vody snadno pochopíme v pojmech vodíkových můstků: je známo, že tetraedrická mřížka ledu tvořená vodíkovými můstky neodpovídá nejkompaktnějšímu možnému uspořádání molekul. Když led taje, část vodíkových můstků se láme, až umožní molekulám se navzájem poněkud přiblížit, na rozdíl od případu, kdy působí všechny vodíkové ionty; tím tedy dochází ke zvýšení hustoty vody.

Dnes existuje velká řada prací využívajících strukturální analýzy k určení struktury vody. Na obr. 3 jsou znázorněny výsledky měření A. H. Nartena et al. [1] z Oak Ridge v USA, která pokrývají oblast teplot od 4°C do 200°C a zachycují radiální distribuční funkci $g(R)$ (střední počet molekul v objemové jednotce kapaliny umístěných ve vzdálenosti R od dané molekuly). Tato funkce vykazuje dvě maxima v místech, kde je elektronová hustota zvýšená, čili kde se nachází molekula vody. První vrchol, který odpovídá nejbližším molekulám, je umístěn ve větší vzdálenosti v kapalně vodě než v ledu. Ale jak je z obrázku vidět, hustota vody, přinejmenším při nízkých teplotách, je vyšší než u ledu, což naznačuje, že vzdálenost mezi nejbližšími molekulami by měla být ve skutečnosti menší než v ledu. Tento rozpor se dá rozhodnout v rámci modelu, v němž voda obsahuje dva typy molekul, z nichž jeden pak není zahrnut do struktury vodíkových můstků.

Z celé řady modelů struktury vody, které byly dosud navrženy, není žádný zcela vyhovující a žádný z nich neposkytuje kvantitativní předpovědi všech vlastností vody. Američtí vědci z Cornellovy univerzity G. Nemethy a H. A. Scheraga [2] v roce 1962



Obr. 3. Existuje mnoho modelů struktury vody, avšak žádný z nich zatím není dokonalý. Jedna z nejdůležitějších veličin svázaná s touto strukturou vody, kterou různé modely musejí korektně reprodukovat, je radiální distribuční funkce. Tato funkce $g(R)$ představuje střední počet molekul v jednotkovém objemu kapaliny ve vzdálenosti R od dané molekuly vody. Na obrázku je normalizována tak, aby se rovnala jedné, když se rovná střední hustotě, tj. makroskopické hustotě. Na obrázku znázorněná měření jsou měření získaná v roce 1967 Nartenem a jeho spolupracovníky [1]. Body odpovídají experimentálními hodnotám získaným měřením difrakce RTG záření, křivky byly vypočteny teoreticky.

interpretovali experimentální výsledky získané v roce 1938 J. Morganem a B. E. Warrem z MIT [3] při měření radiální distribuce jako směs dvou druhů molekul: z jedné části jako shluk molekul vázaných vodíkovými můstky a z druhé části molekul nevázaných. O tři roky později interpretoval tytéž experimentální výsledky Ja. Samojlov [4] zcela odlišně pomocí „intersticiálního“ modelu; v tomto modelu krystalická mřížka molekul vázaných vodíkovými můstky obsahuje dutiny, v nichž se mohou pohybovat ostatní molekuly nevytvářející mřížku, tj. nevázané či intersticiální molekuly. U ledu distribuční funkce takovouto dutinu vykazuje. Zcela odlišný pohled na strukturu vody přinesl model předložený J. A. Poplem [5] z univerzity v Cambridge v roce 1951, v němž vodíkové můstky jsou jakoby stočeny o různý počet stupňů. Vodíkový můstek se považuje za nestočený, pokud je lineární, tj. když atomy O...H-O jsou vázány na přímce. Energie „stočení“ je nulová tehdy, když všechny úhly jsou tetraedrické, jako u ledu.

Modely s vodíkovými stočenými můstky jsou v lepším souhlasu s experimentálními výsledky než modely typu směsi. Například tyto modely zahrnují v kapalné vodě přítomnost poměrně četných vodíkových můstků, umožňujících vysvětlit určité vlastnosti vody. Ví se kupř., že čistá voda je velmi špatný vodič proudu, což lze vysvětlit faktem, že vodíkový můstek brání přenosu elektronů z jedné molekuly na druhou. Naopak vodíkový můstek na druhé straně usnadňuje přenos protonů mechanismem doposud nedokonalé známým, což vysvětluje anomálně vysoké rychlosti protonů, s nimiž se

mohou pohybovat ve vodě. Ostatně tento jev je stále více chápán jako fundamentální v chemii a molekulární biologii (např. ve fotosyntéze, v níž důležitou etapou pochodu uskladnění energie přijaté ve formě slunečního záření je transport protonů buněčnou membránou). Jiná vlastnost, která se váže na přítomnost vodíkových můstků, je ta, že relativně velká energie potřebná pro vypařování vody je vyvolaná faktem, že pro přeměnu vody v páru je třeba roztrhnout vodíkové můstky; tedy čím jsou tyto můstky četnější, tím více energie je třeba dodat.

Nástup velmi výkonných počítačů umožňuje pomocí statistické mechaniky zcela odlišný přístup k této problematice. Při tomto přístupu se definují metodou Monte Carlo na molekule vody tři, čtyři či pět poloh („sites“), na nichž jsou umístěny elektrické náboje. Na rozdíl od předchozích metod struktura vody není definována a priori, ale dedukuje se výpočtem z rozdělení nábojů, které bylo prostudováno. Polohy a s nimi spojené náboje jsou vybrány tak, aby co nejlépe reprodukovaly fyzikální vlastnosti vody. Např. model se třemi polohami, zvaný TIPS 3, navržený chemikem W. L. Jorgensenem a jeho skupinou [6] na Purdue univerzitě v USA, umísťuje jeden elektrický kladný náboj na každý z vodíkových atomů a dvojitý negativní náboj na atom kyslíku. Tak lze získat distribuční funkci i jiné veličiny, které se dají porovnat s experimentem. V případě W. L. Jorgensena byl výpočet proveden pro soubor 125 molekul vody, při čemž bylo využito více než 10^7 různých konfigurací.

Závěry plynoucí ze všech těchto počítačových modelů a výpočtů naznačují, že asi 80 % molekul vody se angažuje ve 3 či 4 vodíkových můstcích; navíc žádný z nich nedovolí umístění nevázané molekuly, v protikladu k závěrům „směsných“ modelů.

Na tomto místě je třeba se zmínit i o „tajemné“ anomální hustotě vody, kterou se nedávno podařilo poprvé úspěšně namodelovat [7]. Jak je známo, pokud se studená voda zahřívá, dosáhne svého minimálního objemu a tím i maximální hustoty při asi 4 °C. Neschopnost vysvětlit tento jev po dlouhá léta snižovala přesnost modelů proteinů na molekulární úrovni i dalších systémů obsahujících vodu. Nedávno vědečtí pracovníci na Texaské technické univerzitě navrhli vysvětlení, které přechází nejbližší a sousední molekuly vody v kapalině a zaměřuje se na vzdálenější molekuly ve druhé vrstvě obklopující danou molekulu vody. Je známo, že ve všech deseti známých formách ledu je molekula H_2O obklopena čtyřmi nejbližšími sousedy stejným invariantním způsobem, přičemž vytváří tetraedrické „jádro“. V nízkohustotním ledu jsou molekuly ve druhé nejbližší vrstvě poměrně vzdálené od jádra. U některých vysokotlakových hustších forem ledu se vodíkové můstky v této druhé sousední vrstvě ohýbají, čímž vytvářejí kompaktnější konfiguraci. Podle G. W. Robinsona [7] tvorba této druhé kompaktní sousední vrstvy spotřebuje poněkud více energie, než je zapotřebí u nízkohustotního uspořádání; „ohnuté“ molekuly jsou proto významnější v kapalině při vyšších teplotách. Při použití jednoduchého jednodimenzionálního modelu získali pracovníci texaské univerzity průběh hustoty–teploty–tlaku vody podobný pozorované závislosti u vody.

To vše potvrzuje, že hustota vodíkových můstků je ve vodě výjimečně zvýšená, zvláště v kapalině. Závěrem je možno se ptát, zda v současnosti máme již konečnou představu o struktuře vody. Odpověď není jasná! Různé práce poskytují náznaky někdy si zjevně navzájem protirečící. Z druhé strany však přesto hlavní linie ve struktuře vody

se pomalu objasňují a definitivní objasnění tohoto problému bude asi kompromisem mezi různými modely, z nichž o některých jsme se zmínili i my.

Voda a život

Spotřeba energie a vody je nepochybně jedním ze základních znaků života. Pomineme-li rozhodující roli vody v elektrolytické disociaci či při hydrataci různých iontů a komplexů, pak vlastní výroba i spotřeba energie v živých systémech probíhá za její přímé či nepřímé aktivní účasti. Přesto při vši rozmanitosti má život podmiňující energetický metabolismus řadu společných základních znaků [8]:

- Zdrojem energie jsou s výjimkou zelených rostlin (v nichž probíhá fotosyntéza) oxidačně-redukční chemické reakce, které probíhají ve vodném prostředí.
- Endogenní pochody (termodynamicky nevýhodné reakce, např. reakce podílející se na aktivním přenosu iontů, pohyblivosti buněk a biosyntéze) nejsou s katabolickými ději (enzymové reakce, při nichž dochází v živých organismech k rozkladu molekul za vzniku energie) spřaženy bezprostředně, nýbrž prostřednictvím pochodů založených na tvorbě (spotřebě) adenosintrifosfátu (ATP): na účet energie oxidačně-redukčních reakcí [9] se fosforyluje ve vodném prostředí adenosindifosfát (ADP) na ATP ($\text{ADP} + \text{P} + \text{energie} \rightarrow \text{ATP} + \text{H}_2\text{O}$), který pak difunduje na místo spotřeby a tam se z něj energie uvolňuje tím, že se štěpí na difosfát nebo monofosfát (AMP).
- Konečně i při fotosyntéze, kdy zdrojem energie je pohlcená sluneční energie (viz např. [9]), tvorba, přenos a štěpení ATP probíhá opět za aktivní účasti vody. Dále pak i uvolňování kyslíku je v ní opět vázáno na fotolýzu molekul vody.

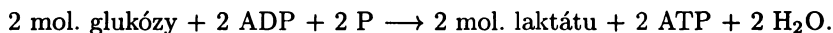
Z velkého množství substrátů, které se účastní oxidačně-redukčních dějů v buňce, lze vybrat soustavy univerzálně rozšířené — viz tabulku 1.

Tabulka 1. Standardní redoxní potenciály

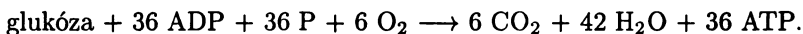
<i>Reduktant</i>	<i>Oxidant</i>	E^0 [V]
Acetaldehyd	Aceton	-0,60
H_2	2H^+	-0,42
$\text{NADH}^1) + \text{H}^+$	NAD^+	-0,32
Laktát	Pyruvát	-0,19
Cytochrom b	Cytochrom b (oxid.)	0,00
Cytochrom c	Cytochrom c (oxid.)	0,26
Voda	Kyslík	0,82

¹⁾ nikotinamidinnukleotid hydrát

Tak například čistá produkce ATP připadající v glykolýze na jednu molekulu glukózy je:



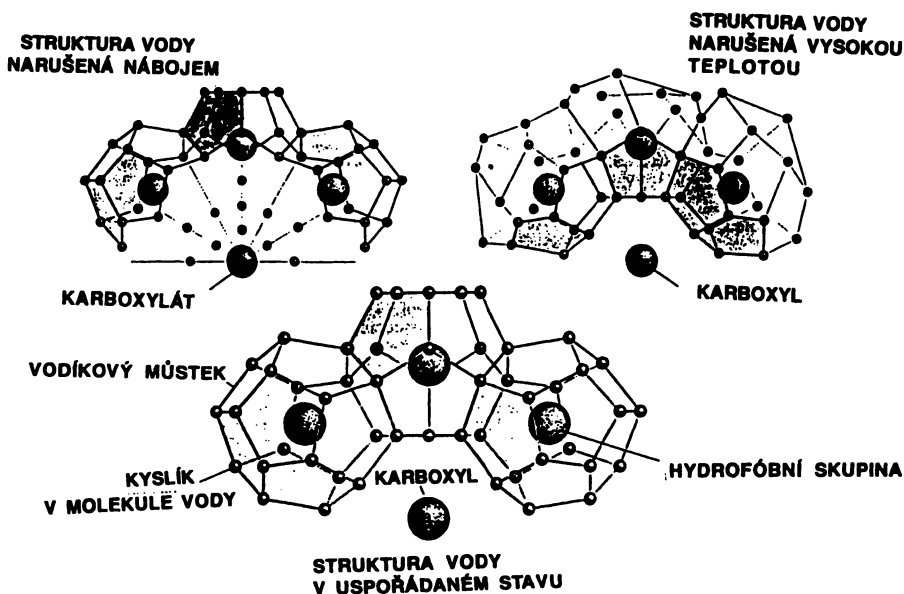
Přitom pokud bychom např. sumarizovali reakce vedoucí od glukózy ke konečné tvorbě vody v dýchacím řetězci, dostaneme, že z jedné molekuly glukózy získáme 36 molekul ATP a 42 molekul vody:



Již tyto příklady jasně ukazují význam molekul vody přímo v katalytických reakcích živých organismů a k tomu je třeba uvést i prostředí, v nichž tyto reakce probíhají — od buněčné membrány až po celé organismy, v nichž voda plní i druhou svoji funkci — nosné kapaliny.

V posledních letech se však ukazují i další velmi významné aspekty „vodního problému“. Jak známo, každý živý organismus představuje vlastně úspěšnou integraci mnoha biomolekulárních „strojů“, které přeměňují energii světla nebo různých surovin na to, co organismus potřebuje — pohyb, teplo či na tvorbu a dispozici vnitřních struktur. Během uplynulých 40 let biochemici vyrobili design proteinů, které vytvářejí základní komponenty těchto strojů. Syntetické biomolekulární stroje mohou napodobovat funkce konkrétních proteinů a přitom jsou mnohem jednodušší. Bylo zjištěno, že podobně jako jejich přírodní vzory syntetické polymerní řetězce existují zpočátku v rozvinutém stavu a potom se s růstem teploty svinují do helixů. Helixy mohou agregovat a vytvářet filamenty, jejichž rozměry jsou například stejné jako u vyčištěného přírodního elastinu. Entropická podstata těchto elastických polymerů rovněž směřuje k základní „otázce“ v jejich chování: jak se může jejich struktura stát uspořádanější s růstem teploty? Vždyť většina materiálů se stává při vyšších teplotách méně uspořádanou, např. při tavení nebo vypařování. Proto se často tato změna v chování polymerů nazývá inverzní teplotou přechodu. Vysvětlení tohoto jevu je podle některých autorů [10] právě ve funkci vody, která proniká polymery. Části polymerního řetězce jsou hydrofobní (apolární) a jiné jsou hydrofilní (polární), molekuly vody se podle toho organizují kolem těchto sekcí molekul v různých konfiguracích (obr. 4). Relativní stabilita těchto konfigurací se mění s teplotou, a tak se i mění preferovaný tvar proteinů. Protože hydrofobní segmenty neinteragují silně s vodou, molekuly vody v jejich blízkosti vytvářejí mezi sebou vodíkové můstky, a tak samy vytvářejí pentagonální strukturu. Toto uspořádání vody pomáhá udržet polymer v roztáženém tvaru: svinutí by vyžadovalo přemístění některých těchto vazeb. Při nízkých teplotách je uspořádaná pentagonální struktura stabilní. S rostoucí teplotou však nastává tendence k neuspořádání a v určitém bodě náhodná tepelná energie vodních molekul postačí k přerušení vodíkových můstků. Pentagonální uspořádání molekul pak opustí amorfní stav tím, že posune vazby, které v objemu charakterizují kapalnou vodu. Bez okolních molekul vody protein pak může zaujmout svůj svinutý tvar. Jak požaduje druhý zákon termodynamiky, růst v neuspořádání vody je větší než růst uspořádanosti řetězce: relativní energie systému roste. Přesná teplota, při

níž nastane přechod, závisí na směsi polárních a nepolárních segmentů v polymeru. Hydrofilní postranní řetězce s aminokyselinami se snaží zvyšovat teplotu přechodu; hydrofobní postranní řetězce ji snižují. Důvodem tohoto chování je fakt, že hydrofilní skupiny, jako je karboxylová (COO^-), vyvíjejí silný tlak na molekuly vody, a tak mohou zničit pentagonální strukturu obklopující přilehlé hydrofilní postranní řetězce. Následkem toho teplota, při níž dojde k narušení uspořádání vody kolem řad hydrofilních skupin, bude mít menší vliv, pokud jsou poblíž hydrofilní řetězce, protože voda již byla zbavena struktury. A tak přidáme-li hydrofilní skupiny k řetězci, zvýšíme tím teplotu přechodu. Přitom však současně hydrofilní skupiny zmenší množství energie potřebné pro svinutí, protože se musí přerušit jen několik málo vazeb pentagonální vody. V řetězci biopolymeru při zavedení jen 2 jednotek karboxylátu na 100 aminokyselinových reziduí základní kostry může snížit množství tepla potřebného pro svinutí o 75 %.



Obr. 4. Definujeme-li si předem rozdělení nábojů uvnitř molekuly vody, můžeme pomocí počítačové simulace určovat typy asociace molekul, které z nich lze odvodit. Podle prací Speedyho et al. [11] na modelu se čtyřmi sity (TIP 4P) se ukazuje, že čím je kapalná voda chladnější, tím více mřížek, kterou vytvářejí vodíkové můstky, se podobá pentagonům. V tomto případě se hydrofobní skupina (molekula) nachází ve středu každého pentagonálního dvanáctistěnu, tvořeného 46 molekulami vody vázanými vodíkovými můstky. Na našem obrázku je pentagonální struktura vody výsledkem vodíkových můstků mezi molekulami vody sousedícími s hydrofobními molekulárními skupinami. Tento nízkoenergetický stav je stabilní při nízkých (střed), ale stává se postupně méně stabilním při vyšších teplotách (vpravo). Nabité hydrofilní molekuly mohou rozrušit tuto pentagonální strukturu (nalevo) tím, že přinutí molekuly vody se podle nich seřadit. Pentagonální voda obklopující řetězec aminokyselin mu může zabránit ve svinutí, protože to vyžaduje energii k přerušování vodíkových můstků, takže se molekuly vody pak mohou vzdálit.

Z toho, co bylo řečeno, je zřejmé, že bílkovinný řetězec se dá protáhnout nebo smrštit, čímž reaguje na jakoukoliv reverzibilní změnu, která zvýší či sníží teplotu přechodu. Například můžeme přeměnit elektrickou energii na pohybovou tím, že přichytíme tzv. prostetickou skupinu (molekulární fragment, který zřídka přijme či uvolní elektrony) k řetězci. Prostetická skupina je hydrofobnější ve svém redukováném stavu, pokud získala elektron, než v oxidovaném. Tím přidávání elektronů snižuje teplotu přechodu řetězce a vyvolá tak jeho svinutí. Biopolymer, který obsahuje hydrofobní rezidua, jako je fenylalanin, může přeměnit tlakové změny na pohyb. Řetězce se svinují při nízkém tlaku a rozvinou se s vyššími tlaky, které favorizují pentagonální strukturu vody. Konečně můžeme měnit světlo na pohyb uchycením vhodné fotosenzitivní skupiny; např. azobenzen či cinnamid přejde z více hydrofobního do více hydrofilního stavu při absorpci světla vhodné vlnové délky.

Nakonec se tedy naskytá otázka, zda s využitím těchto pochodů by nebylo možné určit, zda mechanismus spojený s inverzním teplotním přechodem není ve skutečnosti ten, kterého využívají živé organismy. Zatím současné experimentální výsledky tento směr naznačují. Předně je to neefektivnější známý mechanismus pro „pohánění“ svinování a rozvinování proteinů, který se musel uplatnit během uplynulých tří miliard let v evoluci života na Zemi. Dále fosfáty — výběrová „energetická měna“ je ve většině organismů ve formě ATP a jejich ekvivalentů mimořádně vhodná pro změny v teplotě přechodu. Přidání fosfátu je čtyřikrát efektivnější než přeměňování karboxylové kyseliny na karboxylát. Vázaná ATP, která působí pro tyto účely jako nabitá fosfátová skupina, je stejně účinná. Například určitý polymer se může svinout do uzavřené polohy při teplotě těla, protože jeho okolí je příliš „horké“ pro pentagonálně vázanou vodu, aby mohla kolem něho vytvořit hydrofilní povrchy. Jediná molekula fosfátu či molekula ATP vázaná na protein umožní vodě obklopit oblast v neuspořádané formě a tím posunout rovnováhu k rozvinuté poloze. Například proteiny citlivé na tepelné šoky (rovněž známé jako chaperoniny) pomáhají některým proteinům s významnými hydrofobními povrchy se spirálně svinout. Je zajímavé, že jeden takový chaperonin má tvar homologu ke složce svalu, která váže ATP.

Lze tedy předpokládat, že mechanismy založené na inverzní změně teploty přechodu jsou srdcem většiny biologických přeměn energie. Oxidativní fosforylaci, proces, při němž se chemická energie v potravě přeměňuje na ATP, lze pochopit v pojmech uvedeného mechanismu. Oxidace a redukce protetických skupin uvnitř buněk vyvolává protonové gradienty, které naopak pohánějí fosforylační reakce, které vytvářejí ATP. Všechny tyto energii přeměňující kroky mohou být provedeny svinováním nebo rozvinováním proteinů jako odpověď na změny v jejich teplotách přechodu.

Nepochybně prostorové uspořádání molekul vody ji především předurčuje k její významné roli jak v anorganickém, tak i organickém světě. Nyní na prahu třetího tisíciletí je zvláště zřejmé, jakým nesnadným a složitým objektem výzkumu se voda stala. Nedávno minulo 200 let od doby, kdy A. Lavoisier dokončil své znamenité pokusy, které odkryly složení vody. Od té doby studium vody díky

spojenému úsilí fyziků, chemiků, biologů, geologů, lékařů i dalších specialistů výrazně pokročilo. V tomto období se podařilo shromáždit velmi zajímavé informace o složení vody, o jejích vlastnostech, struktuře, vědci poodkryli oponu a nahlédli do světa atomů a molekul, které vytvářejí neobyčejnou každodenní strukturu vody. Mnoho jsme se zatím dozvěděli o vodě, ale ještě více nás čeká se dozvědět.

Patrně v příštím století biomechanická zařízení budou ovlivňovat náš denní život tak dokonale, jako to činila elektrická zařízení v tomto století!

L i t e r a t u r a

- [1] A. H. NARTEN, M. D. DANFORD, H. A. LEVY: Oak Ridge National Laboratory, Report ORNL-3997, 1966;
A. H. NARTEN, M. D. DANFORD, H. A. LEVY: Discuss. Faraday Soc. 43 (1967), 97.
- [2] G. NÉMETHY, H. A. SCHERAGA: J. Chem. Phys. 36 (1962), 3382.
- [3] J. MORGAN, B. E. WARREN: J. Chem. Phys. 6 (1938), 666.
- [4] JA. SAMOJLOV: *Structure of Aqueous Electrolyte Solutions and the Hydration of Ions*. Consult. Bureau, New York, 1965.
- [5] J. A. POPLE: Proc. Roy. Soc., A205 (1951), 163.
- [6] W. L. JORGENSEN et al.: J. Chem. Phys. 79 (1983), 926;
W. L. JORGENSEN: J. Amer. Chem. Soc. 103 (1981), 335.
- [7] C. H. CHO et al.: Phys. Rev. Lett. 76 (1996), 1651.
- [8] E. H. MERCER: *The Foundations of Biological Theory*. Wiley-Interscience Publ., New York, 1981, 49.
- [9] K. VACEK, S. VACKOVÁ: PMFA 29 (1984), 3, 143.
- [10] DAN W. URRY: Scientific American, January 1995, 44;
DAN W. URRY: Int. J. of Quantum. Chem.: Quantum Biology Symposium, Vol. 21, 1994, p. 3-15.
- [11] R. J. SPEDY et al.: J. Phys. Chem. 91 (1987), 909.
Další přehledná literatura:
- [12] F. FRANKS: *Water*. Royal Society of Chemistry, 1983.
- [13] V. V. SINJUKOV: *Voda izvestnaja i neživestnaja*. Nakl. Znanije, Moskva, 1987.
- [14] G. H. ZACEPINA: *Fizičeskije svojstva i struktura vody*. Nakl. MGU, 1987.