

Ewa BROCLAWIK

Dlaczego woda to życie?¹

Spróbuję podczas wykładu odpowiedzieć, przynajmniej częściowo, na pytanie „Dlaczego woda to życie?”. Jest ono ważne, ponieważ ochrona zasobów wody należy do najbardziej palących problemów świata. Co roku, 22 marca, obchodzimy Światowy Dzień Wody, aby uświadamiać społeczeństwu, że w naszej populacji blisko dwa miliardy ludzi nie ma dostępu do bezpiecznej wody pitnej lub jest on ograniczony. Niestety nadal jako ludzkość beztrwosko niszczymy jej zasoby, za które jesteśmy współodpowiedzialni. Być może większość z nas nie wierzy, że od tego naprawdę zależy jednostkowe życie, dlatego nigdy dość przypominania i tłumaczenia.

Jestem chemikiem molekularnym, który narzędziami teoretycznymi bada właściwości oraz zachowanie cząsteczek chemicznych i ich zbiorowisk, tak też poprowadzę wywód. Przynajmniej pragnę uzasadnić moje przekonanie, że wielu badaczami z tej dziedziny, że za niezwykle zachowania i właściwości zwykłej wody odpowiedzialne są sieci wiązań wodorowych niezwykle wrażliwe na warunki zewnętrzne: temperaturę czy zanieczyszczenia.

Jeśli popatrzymy na wodę jako zbiór prostych cząsteczek chemicznych (mówiąc woda mamy na myśli dobrze znaną, zwykłą ciecz) to nie dostrzegamy się niczego niezwykle. Ale już dla dwóch cząsteczek wody ujawnia się nowe, niezwykle zachowanie: pojawia się nowe oddziaływanie pomiędzy cząsteczkami, zwane wiązaniem wodorowym HB. Nie jest ono zwykłym, silniejszym bądź słabszym wiązaniem chemicznym między dwoma atomami lub fragmentami makrocząsteczki. Aby zrozumieć jego istotę, trzeba zdać sobie sprawę, że oddziaływanie to angażuje dwa atomy cięższe, często pochodzące z dwóch różnych molekuł (tutaj tlenu dwóch cząsteczek wody)

¹ Streszczenie wykładu wygłoszonego podczas Uroczystego Posiedzenia Publicznego w dniu 17 czerwca 2023 r. Cały wykład dostępny on-line: <https://www.youtube.com/watch?v=irAHoZFgFGI>

„spajane” przez atom wodoru, który jest w orbicie oddziaływania obydwu cięższych partnerów poprzez ich wolne pary elektronowe. Proste obrazki wzięte z symulacji komputerowych pozwalają zrozumieć, jak to się dzieje, że jedna woda „odbiera” wodór drugiej, co powoduje nienasycenie tej ostatniej: szuka więc ona kolejnego partnera i tworzy wiązanie wodorowe z następnym sąsiadem. W wyniku tego następuje propagacja ustrukturyzowania i tworzy się sieć przestrzenna wiązań wodorowych, źródło niezwykłych właściwości wody. Właściwości strukturotwórcze wiązań wodorowych wynikają z jednej strony z ich umiarkowanej mocy, a z drugiej z synergicznego wzmacniania energii wiązania całej struktury. Są one słabsze od typowego wiązania chemicznego, co powoduje dużą mobilność struktury, ale wystarczająco silne, aby synergicznie utrzymać chwilową sieć. Taka labilna struktura musi być silnie zależna od temperatury i ciśnienia, co tłumaczy nietypowe zachowanie w czasie zamarzania i topnienia, a także inne właściwości niespotykane w przypadku wielu substancji.

Kilka przykładów z życia. Tylko woda jest cieczą w kluczowym dla życia zakresie temperatur od 0°C do 100°C i jest rozpuszczalnikiem dysocjatywnym dla kwasów, zasad i soli oraz wykazuje wysokie przewodnictwo protonowe (transport jonów). Ma też najwyższe napięcie powierzchniowe i anomalie temperaturową gęstości (jest ona najwyższa w temperaturze +4°C, co powoduje, że woda nigdy nie zamarza do dna jeziora czy rzeki), a ponadto anomalie ciśnieniową lepkości (stąd lód topi się pod naciskiem płózy sanek lub łyżwy).

Pojawia się intrygujące pytanie: skoro woda jest wszechobecną w naszym świecie substancją o unikalnych cechach, kluczową dla procesów życiowych, zbudowaną z małych prostych cząsteczek, o których wiemy prawie wszystko, to dlaczego właściwości wody pozostają zagadką? Przecież istnieją prawa mechaniki kwantowej, które rządzą wszystkimi cząstkami i opisują świat. Mamy świetnie wykształconych fizyków i chemików zajmujących się teorią oraz informatyków tworzących skuteczne narzędzia o wysokiej wydajności służące modelowaniu molekularnemu, dysponujemy znakomitymi komputerami i sztuczną inteligencją, która wydajniej od człowieka zajmuje się milionami danych i wykrywa zależności między nimi. Czego zatem brakuje?

Otóż okazuje się, że co prawda mechanika kwantowa z założenia powinna opisywać wszystkie zjawiska we wszechświecie, ale pojawia się problem dokładnego rozwiązania jej równań dla złożonego układu, np. zbiorowiska cząsteczek chemicznych. Aby znaleźć rozwiązania odpowiednich równań fizyki molekularnej dla zespołu milionów cząsteczek wody, potrzebne jest dramatyczne narzucenie założeń upraszczających oraz ograniczenia dokładności obliczeń. Jest to krytyczne zwłaszcza dla wodoru, najlżejszego pierwiastka

chemicznego, który odpowiada za tworzenie sieci wiązań wodorowych determinujących właściwości wody. Z punktu widzenia badacza struktur molekularnych ośmielę się postawić tezę, że tylko umysł człowieka, dzięki zdolności krytycznego wyboru rzeczy najważniejszych i zaniedbania mniej ważnych, potrafi stworzyć spójną, ale praktyczną teorię opisującą badany wycinek rzeczywistości. Tylko człowiek jest władny stworzyć skuteczne narzędzia służące efektywnemu modelowaniu struktur supramolekularnych i ich dynamiki, a ponadto krytycznie ocenić ich wiarygodność. To człowiek stworzył systemy programów komputerowych Dynamiki Molekularnej, które symulują na podstawie praw kwantowych strukturę badanego systemu (na przykład białko, woda) i jej zmiany w czasie. Symulacje takie nie mogą być dokładne, gdyż wymagają w praktyce zbudowania modelu molekularnego badanego zjawiska oraz zaawansowanej analizy wyników, wobec tego wynik końcowy zależy w znacznym stopniu od naszej wiedzy i intuicji. Dopiero doświadczony badacz potrafi dostrzec w wynikach symulacji prawdziwe piękno natury i rządzących nią praw.

Pokażę na kilku przykładach skuteczność najnowszych metod symulacji molekularnych istotnych dla życia procesów biologicznych zależnych od obecności wody. Jednym z przykładów jest białko błonowe w mitochondrium, gdzie zachodzi oddychanie komórkowe. Proces ten zależny jest w krytyczny sposób od transportu protonów (kationów wodoru) przez błonę, z wnętrza mitochondrium do przestrzeni pomiędzy błonami. Są one tam gromadzone i dostarczane w odpowiednim momencie do komory reakcyjnej w sposób ściśle skoordynowany z transportem elektronów.

Wnikliwa analiza trajektorii (dynamiczny zapis struktur ruchu cząsteczek z symulacji) nasuwa pomysł, że przekaz protonów następuje wzdłuż łańcucha cząsteczek wody za pośrednictwem systemu wiązań wodorowych przekazywanych od cząsteczki do cząsteczki. Prowadzi to do hipotezy, że obecność lub nieobecność wody w odpowiednim kanale otwiera bądź zamyka bramkę dla transportu i steruje całym procesem. Analiza symulacji nie jest oczywiście ścisłym dowodem, ale stanowi mocną przesłankę do zaprojektowania odpowiedniego eksperymentu weryfikującego tę hipotezę. Eksperyment taki jest o wiele kosztowniejszy niż modelowanie komputerowe i wymaga zgromadzenia dobrze uzasadnionych funduszy.

W wykładzie pokażę jeszcze kilka podobnych przykładów analizy ścieżek translokacji protonu na podstawie wyników symulacji dynamiki molekularnej, obrazujących bezsprzeczny udział cząsteczek wody połączonych wiązaniami wodorowymi w transporcie protonów wzdłuż łańcucha białkowego czy w transporcie jonów przez kanały jonowe w błonie. Przykłady te nasuwają ważny wniosek, że bez obecności wody skomplikowane mechanizmy procesów życiowych nie zachodziłyby według alarmowych sygnałów,

bo w „suchym” białku przerwane zostałyby przekaźniki dla odpowiednich sygnałów z mózgu do organów odpowiedzialnych za procesy życiowe.

Powtórzmy więc jeszcze raz. Woda to życie, bo czynnie uczestniczy w procesach związania się białka i pośredniczy w tworzeniu struktury trzecio- i czterorzędowej; wspiera strukturę komórki przez rolę strukturotwórczą – zachowanie kształtu jest niezwykle ważne dla udziału białek w procesach biochemicznych; bierze udział w procesach selektywnego transportu elektronów i jonów; wreszcie wewnątrz komórek cząsteczki wody uczestniczą w procesach utleniania i redukcji umożliwiających wytworzenie energii. Chrońmy więc zasoby wody na naszej planecie i dbajmy o jej czystość!