

Může termodynamika přispět k pochopení existence života?

Jan Duršpek, Plzeň

1. ÚVODNÍ POZNÁMKY

Školská fyzika se obvykle nezabývá živými organizmy. Přesto si můžeme na několika zajímavých, jednoduchých a poměrně atraktivních fyzikálně-chemických pokusech demonstrovat některé vlastnosti živých organismů a přiblížit se podstatě života jako fyzikálního jevu.

Pokud bychom chtěli určit nějakou fyzikální vlastnost společnou všem živým organismům, byla by to zřejmě jejich vysoká uspořádanost na několika úrovních. Atomy jsou složitě uspořádány do makromolekul, makromolekuly tvoří strukturu buňky, a buňky jsou složitě uspořádány do mnohobuněčného organismu. Jen pro představu si můžeme vzít asi ten nejsložitější známý systém ve vesmíru – lidský mozek. Pouze v kůře lidského koncového mozku je téměř 10^{10} nervových buněk, přičemž každá je spojena průměrně 17 000 synapsemi („komunikačními“ spojkami) s dalšími buňkami. A k tomu ještě můžeme připočítat několik možných typů chemických signálů, vyvolávající odlišnou odpověď, jimiž může buňka reagovat [1].

Uspořádanost statisticky souvisí s možným počtem realizací daného stavu. Čím větší je počet realizací, tím klesá uspořádanost. S logaritmem počtu realizací daného stavu souvisí termodynamická veličina entropie. Entropie je mírou neuspořádanosti systému. Vypovídá o vnitřní struktuře systému a tím i o kvalitě transformace energie a hmoty v systému. Čím vyšší je entropie systému, tím méně struktur v něm existuje a tím více se i pohyb podsystemů stává méně uspořádaným.

Entropie je také termodynamický potenciál, veličina, která v izolovaném systému nabývá svého maxima při dosažení rovnovážného stavu. Její další změna (produkce) je pak v tomto stavu nulová.

Popisem rovnovážných systémů se zabývá klasická termodynamika, která se vyučuje na středních školách, a jejíž páteř tvoří tři zákony termodynamiky¹.

Živé organismy jsou systémy nerovnovážné, otevřené a mohou existovat právě jen proto, že jsou otevřené. Krystal můžeme od okolí izolovat, ale buňky zanikají, jsou-li od svého okolí odděleny. Živé systémy vytvářejí nedílnou součást okolního světa, ze kterého čerpají potravu, a nemohou být odděleny od toků energie a látky, které nepřetržitě přeměňují. Využívají okolní energii na udržení, popřípadě zvýšení své vlastní uspořádanosti. Známe však také mnoho otevřených nebo uzavřených² systémů neživých, například z oblasti dynamiky tekutin či katalytických chemických reakcí.

Studiem neizolovaných systémů se zabývá nerovnovážná termodynamika. Její rozvoj je spojen především se jmény Larse Onsagera a Ilyi Prigogina³. Tato oblast termodynamiky se zatím vyučuje



Lars Onsager (1903–1976)



Ilya Prigogine (1917–2003)

¹ Někdy je uváděn ještě čtvrtý, resp. „nultý“ termodynamický zákon.

² U otevřených systémů dochází k výměně látky a energie mezi systémem a okolím, u uzavřených dochází pouze k výměně energie.

³ Oba dva byli také za svůj přínos v oblasti nerovnovážné termodynamiky a v teorii disipativních struktur oceněni Nobelovou cenou za chemii (Onsager v roce 1968 a Prigogine roku 1977).

pouze na některých vysokých školách zejména ve spojitosti s biofyzikou.

Nerovnovážnou termodynamiku můžeme rozdělit na lineární a nelineární. V lineární nerovnovážné termodynamice můžeme ještě použít některé poznatky rovnovážné termodynamiky, díky principu lokální rovnováhy můžeme systém nadále popisovat termodynamickými potenciály. Systém nespěje jako u rovnovážného systému k nulové produkci entropie, ale pouze k její minimální hodnotě, slučitelné s hraničními podmínkami systému souvisejícími s neizolovaností systému. Tento ustálený stav se pak nazývá stacionární.

V nelineární nerovnovážné termodynamice jsou termodynamické síly působící na otevřený systém příliš velké a systém ve stacionární stavu se stává nestabilní a vlivem fluktuací se od něj vzdaluje. Případný potenciál, který charakterizuje chování systému, musí mít vlastnosti Ljapunovy funkce.

Nedílnou vlastností nerovnovážných systémů je vytváření makroskopických struktur, které nejsou jednoznačně odvoditelné z chování molekul tvořících systém. Tuto vlastnost mají nerovnovážné systémy díky tomu, že v nich může dojít k velkému zesílení náhodných, neměřitelných a nepředvídatelných poruch – fluktuací.

Aby odlišil výše zmíněné struktury od rovnovážných, nazval je Prigogine *disipativní*, protože rozptylují (disipují) jimi protékající energii do okolí a zároveň se na úkor okolí také zbavují entropie, tedy zvyšují entropii svého okolí. Neboli jak to formuloval E. Schrödinger [5]: „Živí se zápornou entropií.“

Poznání, že disipativní struktury vznikají spontánně všude tam, kde existují systémy vzdálené od rovnováhy, kterými protéká energie, představuje průlom v myšlení mnoha vědních disciplín. Mimo jiné to znamená, že už není nutno nahlížet život jako navýsost nepravděpodobný a ve vesmíru ojedinělý fenomén.

Vznik disipativních struktur v nerovnovážných systémech v oblasti hydrodynamiky či chemie si můžeme prezentovat formou relativně jednoduchých a poměrně atraktivních fyzikálních a chemických pokusů. Můžeme na nich demonstrovat mnoho vlastností společných s živými organizmy.

2. VZNIK BÉNARDOVÝCH BUNĚK

Ohřev dna nádoby ve které se nachází tenká vrstva kapaliny s volným povrchem, může být příčinou vzniku struktury ve tvaru obrazce složeného z šestihranných buněk (také pětihranných i čtyřhranných). Tyto buňky popsal jako první H. Bénard v roce 1900 a jsou dnes podle něho nazývané *Bénardovými buňkami*.

Jaká je fyzikální podstata? Neuvažujme zpočátku povrchové napětí. Zahříváme-li pozvolna tenkou vrstvu kapaliny, mikroskopický pohled by zpočátku ukázal neuspořádaný pohyb molekul účastnících se vedení (kondukce) tepla. Teplo se šíří vedením v souladu s Fourierovým zákonem vedení tepla. Závislost teploty na vzdálenosti z ode dna nádoby je dána vztahem:

$$T = T_1 - \frac{\Delta T}{H} \cdot z, \quad (1)$$

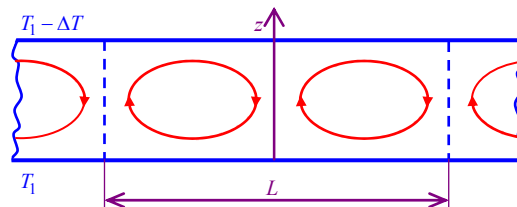
kde T_1 je teplota kapaliny u dna nádoby (T_1 se zahříváním dna zvyšuje), H je výška kapaliny, $\Delta T = T_1 - T_2$, T_2 je teplota kapaliny při hladině.

Systém můžeme popsat tzv. *Rayleighovým číslem* (Ra), které závisí na rozdílu teplot ΔT a vlastnostech kapaliny:

$$Ra = \frac{\beta \cdot g \cdot H^3 \cdot \Delta T}{k \cdot \nu}, \quad (2)$$

kde β je součinitel teplotní roztažnosti, g je konstanta tíhového zrychlení, k součinitel teplotní vodivosti, ν součinitel kinematické viskozity. Vrstvy kapaliny v horní části systému jsou hustší, tedy hmotnější než ve spodní části. Při určité kritické hodnotě Rayleighova čísla Ra_{kr}

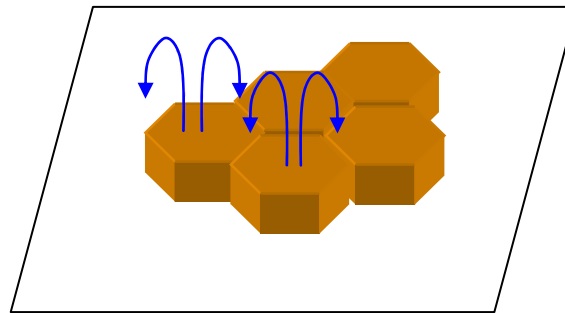
tíha horní vrstvy kapaliny převládne nad dosud stabilizujícími viskózními silami. V systému nastává konvekční proudění. Ohřev spodních vrstev kapaliny vede k jejich expanzi, snížení hustoty a jejich stoupání působením vztlaku směrem vzhůru. Chladnější vrstvy v horních částech kapaliny klesají směrem ke dnu. Proti tomuto pohybu částí kapaliny působí viskózní síly a chaotický pohyb tepelné vodivosti. Výsledkem těchto opačných tendencí je makroskopický pohyb kapaliny ve tvaru válců. Při zvyšování Rayleighova čísla nad Ra_{kr} (např. zvyšováním ΔT) stoupá skokově i počet válců v jednotkovém objemu (odpovídá různým stacionárním stavům) a následně se mohou objevovat i chaotické režimy (může také docházet k podélnému prohýbání válců).



obr. 1: Schéma konvekčních válců (podle [2])

Uvažujeme-li povrchové napětí, které závisí na teplotě, teplotní gradient neexistuje pouze ve dvou dimenzích, ale v rámci jednotlivých buněk díky fluktuacím teploty na hladině kapaliny ve všech třech dimenzích. Na myšleném průřezu Bénardovými buňkami bychom viděli výše zmíněné konvekční válce. Taktéž počet buněk v jednotce objemu by se zvyšoval se stoupajícím Rayleighovým číslem.

Mechanismus vzniku Bénardových buněk si pak můžeme představit takto: Předpokládejme, že v jistém bodě horního povrchu nastane fluktuace teploty ΔT od teploty v okolních bodech. Nechť například $\Delta T < 0$. Povrch má tendenci se smršťovat k tomuto chladnému bodu – k místu, kde je větší povrchové napětí. Kapalina zde tedy klesá dolů (místa na okrajích Bénardových buněk). V jiných místech musí kapalina stoupat nahoru, přičemž se vzdaluje od chladného místa (středů Bénardových buněk).



obr. 2: Schéma Bénardových buněk (podle [9])

Dochází k lokálnímu poklesu entropie a vzniku samospořádání. Molekuly se nejdříve pohybují chaoticky, při konvekci se pohybují uspořádaně (molekuly v sousedních konvekčních válcích se pohybují s konstantní vzdáleností).

Můžeme zde tedy pěkně demonstrovat vznik struktury na základě zesílení fluktuace v nerovnovážném, nestabilním systému. Nemůžeme určit (díky fluktuacím), kde se objeví první buňka. Jde o citlivou závislost na výchozích podmínkách.

Kvantitativně lze konvekci popsat pomocí systému nelineárních rovnic, vyjadřujících v podstatě bilanci hmotnosti, hybnosti a energie (s uvážením hraničních podmínek). Jsou to základní rovnice hydrodynamiky, tj. Navierova-Stokesova rovnice, rovnice kontinuity a rovnice vedení tepla. Řešení těchto rovnic v analytickém tvaru je obtížné, proto se užívají numerické metody, nebo se výchozí rovnice zjednodušují mnohdy až výrazným způsobem (Lorenzův model).

Vznik Bénardových buněk lze dobře pozorovat ve viskóznější kapalině (oleji) s přimíchaným hliníkovým práškem. Ideální nádoba by měla mít homogenně tepelně vodivé dno, pokud možno tepelně nevodivé stěny, stačí však Petriho miska.



obr. 3: Bénardovy buňky. Vlevo větší vertikální gradient teploty T , vpravo menší [foto autor]

Na počátku zahřívání se kapalina nachází v klidu. Vidíme klidný povrch oleje. Při překročení kritické hodnoty vzniká struktura buněk. Kapalina proudí ze středu směrem okrajům buněk. Na myšleném průřezu buňkou bychom viděli dva konvekční „válc“ , které rotují navzájem v opačném směru. Defekty struktury mohou být způsobeny jak nerovnoměrným přiváděním tepla a nerovnoměrným ochlazováním povrchu kapaliny, tak tím, že není zaručena stejná tloušťka vrstvy – dno není dokonale rovné.

Při změně gradientu teploty se mění velikost a počet buněk v misce, což souvisí se snižujícím se počtem konvekčních válců v objemové jednotce s klesajícím gradientem teploty. Změnou počtu a velikosti buněk lze demonstrovat přechod mezi jednotlivými stacionárními stavy.

Stabilitu struktury buněk vzhledem k malým poruchám můžeme demonstrovat narušením struktury mechanickým zásahem. Po zásahu se struktura relativně brzy obnoví. Rozměr buněk závisí na tloušťce vrstvy. Zmenšíme-li objem nádoby při zachování objemu (hmotnosti) kapaliny, nebo přilijeme-li olej do nádoby, rozměry buněk vzrostou.

Vznik konvekčních buněk můžeme velmi zjednodušeně, ale didakticky přínosně chápat jako analogii existence živého systému. Podobně jako Bénardovy buňky existují pouze při trvajícím gradientu teploty, existuje živý organismus závisle na dodávce energie přicházející ze Slunce zářením (záření „pohání“ fotosyntézu, díky níž se pak energie využívá k zajištění existence dalších živých organismů). Přestane-li přenos energie systémem (přestaneme zahřívát dno nádoby, vyhasne Slunce), zaniknou jak buňky Bénardovy, tak buňky živé.

Výzkum jevů, v nichž vznikají konvekční válce nebo buňky, má velký význam v meteorologii, oceánografii, při zabezpečování ventilace prostorů, či při studiu slunečních granulací.

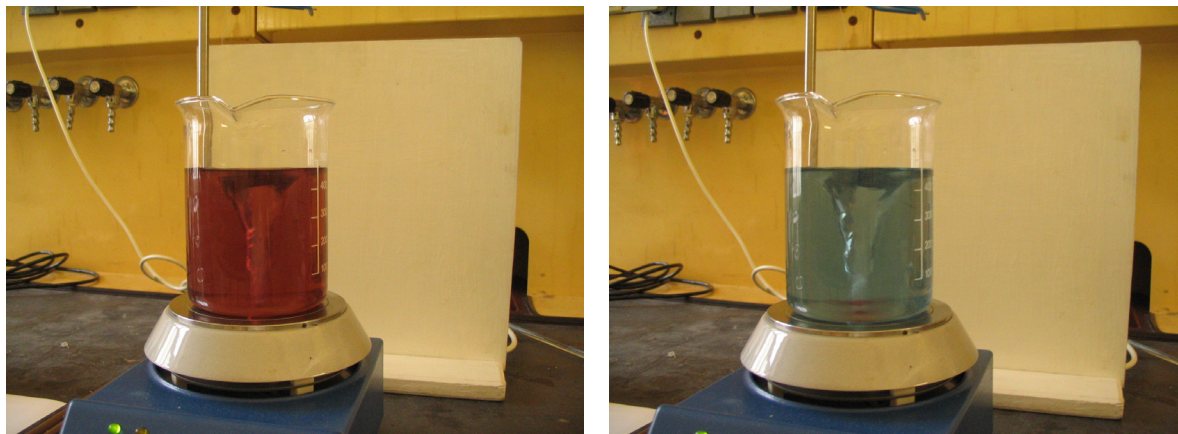
3. CHEMICKÉ OSCILACE

Dalším příkladem otevřeného systému a vzniku struktur jsou chemické oscilační reakce. Jde o autokatalytické reakce⁴, přičemž se současně s autokatalytickou látkou vytváří postupně látka inhibiční, která tuto autokatalytickou reakci inhibuje. Dochází tak k periodické oscilaci jednotlivých chemických komponent, včetně jednotlivých forem redoxních katalyzátorů, které se projevují barevným zbarvením. Můžeme pozorovat periodickou změnu zbarvení reakční

⁴ Při autokatalytických reakcích vznikající látka dále katalyzuje vznik sebe sama, je příkladem pozitivní zpětné vazby.

směsi. Pokud bychom dodávali do reakční směsi neustále reaktanty a odebírali produkty, jak odpovídá otevřenému systému, šlo by o oscilace netlumené. Vzhledem k neustálému promíchávání systému koncentrační změny nastávají prakticky v celém objemu najednou. V tomto případě vznikají časové struktury. Tyto reakce se též nazývají chemické hodiny.

Nejznámější je Bělousova-Žabotinského reakce. Jde o oxidaci organické látky (například kyseliny malonové) bromičnanem, katalyzovanou redoxním katalyzátorem. Autokatalytickým meziproductem je zde kyselina bromitá, jako inhibitor zde působí vznikající bromid. Nejčastěji používanými redoxními systémy jsou $\text{Ce}^{3+}/\text{Ce}^{4+}$ (bezbarvá/žlutá), $\text{Mn}^{2+}/\text{Mn}^{3+}$ (bezbarvá/růžová) a ferrin Fe^{2+} /ferroin Fe^{3+} (červená/modrá). Perioda je různá, řádově v desítkách sekund.



obr. 4: Střídání červené (ferroin) a modré (ferrin) barvy v Bělousově-Žabotinského reakci [foto autor]

Briggsova-Rauscherova reakce je oxidace peroxidu vodíku a kyseliny malonové jodičnanem katalyzovaná manganatými ionty. Vznik jodidu a jodu lze zviditelnit přidáním škrobu (modrofialové zabarvení), perioda 10 s.



obr. 5: Briggsova-Rauscherova reakce [foto autor]

Vzhledem k tomu, že velká část biochemických reakcí probíhajících v živých organizmech je autokatalytických, můžeme pozorovat oscilace i v živém organismu. Příkladem jsou enzymové oscilace jako například oscilace glykolýzy pozorovaná u kvasinek.

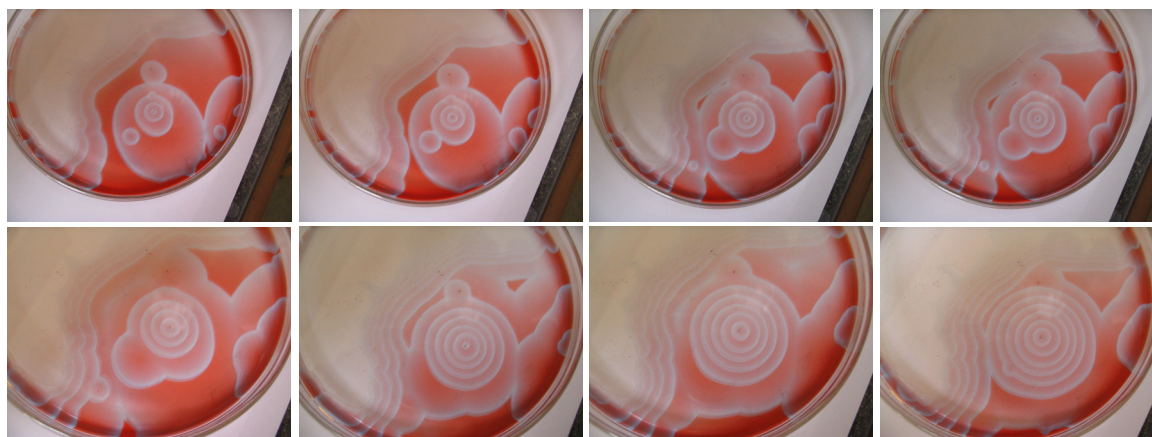
Autokatalytické samouspořádávání bylo zjištěno na úrovni oligonukleotidů. V roztoku oligonukleotidů vznikaly autokatalyticky vícečetné řetězce nukleotidů, tedy molekuly RNA, která je předpokladem existence života.

Oscilace na úrovni přepisu genetické informace do molekul proteinů jsou podstatou tzv. biologických hodin. Projevují se víceméně pravidelným opakováním určitých dějů v tělech organismů. Tyto rytmy jsou vnitřní, endogenní, nezávislé na vnějších podmínkách. Jejich perioda je velmi různorodá.

4. CHEMICKÉ VLNY

Vznik chemických vln jako příklad nerovnovázné prostorové struktury, můžeme pozorovat v tenké vrstvě reakčního média pro Bělousovovu-Žabotinského reakci například na Petriho misce. Jde o spojení oscilační reakce a difúze.

Chemické oscilace začínají v tzv. iniciačních centrech. Ta jsou způsobena buď heterogenitami (například prachovými částicemi, plynovými bublinkami apod.), nebo vznikají v důsledku fluktuace koncentrací reagentů, které generují chemickou vlnu. Vznik iniciačního centra v důsledku fluktuace je typický případ citlivé závislosti na výchozích podmínkách u nerovnovážných systémů. Z iniciačního centra se šíří reagenty difúzí a autokatalyticky je spuštěna oscilační reakce v určité vzdálenosti od iniciačního centra. Reakci můžeme též iniciovat ponořením stříbrného drátku (stříbro se oxiduje, katalyzátor se redukuje).



obr. 6: Koncentrické vlny [foto autor]

Můžeme pozorovat vznik tří druhů vln. Koncentrické vlny vznikají v případě homogenní reakční směsi. Při přerušení koncentrické linie vznikají reverberátory. Při zániku jednoho z ramen reverberátoru vznikají spirálové vlny. Mohou mít tvar Archimédovy či logaritmické spirály.



obr. 7: Reverberátory a spirální vlny [foto autor]

Systémy, v nichž probíhají jak chemické reakce, tak i difúzní procesy, jsou popsány v případě dvousložkového systému soustavou diferenciálních rovnic:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= f(u, v) + D_u \cdot \Delta u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= g(u, v) + D_v \cdot \Delta v. \end{aligned} \tag{3}$$

Zde u , v jsou koncentrace složek (reagentů), D_u , D_v jsou součinitelé difúze složek u , v , nelineární výrazy $f(u, v)$ a $g(u, v)$ vyjadřují přírůstek (resp. úbytek) složek u a v jako důsledek chemické reakce. Předpokládá se, že v tomto systému každý bod (objemový element) reakčního prostoru koná či může konat autooscilace a že existuje difúzní spřažení mezi těmito body (objemovými elementy).

Soustava typu (3) popisuje nejen chemicko-difúzní procesy, ale i překvapivě mnoho důležitých procesů. Můžeme pomocí ní modelovat různé biologické procesy, například morfogenezi, vznik barevných vzorů (například na schránkách měkkýšů), či přenos vzruchu a vznik srdečních arytmií, ale také procesy, kterými se zabývá ekonomie, či sociologie.



obr. 8: Vznik vln v tenké vrstvě Bělousovově-Žabotinského reakčním médiu na Petriho misce [foto autor]

Jedním z nejzajímavějších příkladů vzniku uspořádání je morfogeneze (vznik mnohobuněčného jedince) hlenky *Dyctiostelium discoideum*. Hlenky řadíme do říše Houby (Fungi). Hlenky existují jako jednotlivé jednobuněčné améby živící se především bakteriemi (fáze trofická). Pokud jim dojde potrava, přecházejí do fáze reprodukční. Začnou produkovat cyklický adenosinmonofosfát (cAMP), který difunduje k dalším amébám. Jakmile další améby dostanou signál, začnou jednak také vytvářet cAMP, jednak se pohybují ve směru největší koncentrace cAMP. Původně stejnocenné buňky se postupně shlukují a v závislosti na vzdálenosti od shlukovacího centra (tj. hlenky, která díky fluktuaci potravy pod kritickou mez začala vytvářet cAMP a v okolí bylo dostatek dalších buněk reagujících na chemický signál) pod vlivem cAMP a jiných chemických signálů exprimují různé geny a diferencují se v několik základních typů. Při počtu asi 10 000 buněk vzniká mnohobuněčný jedinec, který je schopen se pohybovat určitým směrem, pak se usadit, vytvořit tzv. fruktifikační tělíčko a vytvořit spóry, z kterých vzniknou nové améby.

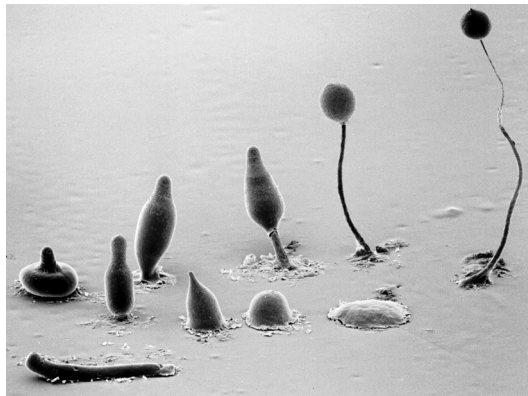
Jde tedy o autokatalytickou reakci – cAMP podporuje vznik sebe sama. Současně je však potřeba obnovy ATP z cAMP enzymem fosfodiesterázou⁵. Tento enzym zde tedy působí jako inhibitor shlukování. Vzniká oscilační reakce mezi cAMP a ATP. Díky difúzi cAMP i fosfodiesterázy se oscilace šíří jako chemická vlna. Shlukování améb probíhá tedy periodicky v jakýchsi pulsech.

Díky tomuto principu se tedy 10 000 zprvu stejnocenných buněk dokáže „domluvit“ a jako celek se někam pohybovat a vytvořit několik základních orgánů. Stejný princip mechanismu pulzního shlukování jako šíření chemické vlny efektně dokazuje i makroskopický pohled na shlukující se kolonii hlenek na následujících obrázcích. Můžeme zde pozorovat všechny druhy vln (koncentrické, spirálové i reverberátory). Pouze spirálové vlny zde vedou ke vzniku mnohobuněčného jedince.

⁵ Systém adenylátcyklázy a fosfodiesterázy je běžný i v našem těle. cAMP však působí pouze intracelulárně jako tzv. druhý posel. Jako vnější signalizační molekuly zde působí řada hormonů stimulačních i inhibujících adenylátcyklázu. Přenos signálu přes membránu od receptoru k adenylátcykláze je uskutečněn tzv. G-proteiny, které hrají důležitou roli i v morfogenezi hlenky.



obr. 9: Shlukující se kolonie hlenek připomínající chemické vlny [6]



obr. 10: Vývoj mnohobuněčného stadia hlenky [8]

5. ZÁVĚR

Na poli nerovnovážné termodynamiky dochází k zajímavému spojení fyziky, chemie a biologie. Formou atraktivních pokusů prováděných na středních či některých vysokých školách můžeme studentům demonstrovat a přiblížit vznik nerovnovážných struktur s motivujícím odkazem na problematiku vzniku a existence živých organismů.

Literatura:

- [1] Čihák R.: *Anatomie 3*. Avicenum, Grada, Praha 1997.
- [2] Horák J., Krlín L.: *Deterministický chaos*. Academia, Praha 1996.
- [3] Markoš A.: *Povstávání živého tvaru*. Vesmír **76**, č. 5 (1997), 284.
- [4] Prigogine I., Kondepudi D.: *Modern Thermodynamics*. John Wiley & Sons, Chichester 1998.
- [5] Schrödinger E.: *What is life? The Physical Aspects of the Living Cell*. Cambridge University, London 1944.
- [6] Ševčíková H.: *Chemické vlny v laboratoři i v přírodě*. Vesmír **75**, č. 3 (1996), 137.
- [7] Štrunc M., Kheilová M.: *Příklady vzniku disipativních struktur v nerovnovážných, nelineárních systémech*. VUT, Brno 1998.
- [8] <<http://dictybase.org>> *An Online Informatics Resource for Dictyostelium* (anglicky).
- [9] <<http://www.enseiht.fr/hmf/travaux/CD0001/travaux/optmfn/hi/hi.htm>> *Hydrodynamic instabilities* (anglicky).