

УДК 577.3, 577.212

## МНОГОЧАСТИЧНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗНИКНОВЕНИЯ РЕЗОНАНСНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ, ПРИВОДЯЩЕГО К НОВОМУ ТИПУ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

С. А. Позднеев

*Предложен один из возможных механизмов возникновения химической связи в молекулах, основанный на эффекте возникновения специфического многочастичного взаимодействия, при условии малости энергии связи между кластерами этой системы.*

В настоящее время установлено [1], что природа химической связи определяется кулоновским взаимодействием между электронами, электронами и ядрами, и никаких особых сил химического взаимодействия не существует. Это не означает, что теория химической связи разработана окончательно.

Существует ряд нерешенных вопросов. Если за образование молекул из атомов ответственны дальнедействующие кулоновские силы, то почему химические взаимодействия проявляются главным образом на очень коротких расстояниях и каким образом возникает свойство насыщенности химических сил? Каким образом реализуется химическая связь в молекулах-галогенидах позитрония, как влияет химическая связь на рассеяние тепловых нейтронов и нуклонов [1, 2]? Следующие вопросы возникают при исследовании химической связи молекулярных структур, таких как биополимеры, белки и т.д. Основная проблема, которая возникает при исследовании сворачивания белка, конструировании новых типов лекарств и т.д. – это объяснение почему белковые цепи, модифицированные после биосинтеза, способны сами без посторонней помощи формировать нативные структуры [3, 4]. Анализ этого явления также показывает [3–6], что нативное и денатурированное состояния белковой молекулы наблюдаются в заметных количествах вблизи точки перехода, а полуденатурированные состояния присутствуют в пренебрежимо малых количествах. Кроме этого, белковая цепь имеет огромное

количество возможных конформаций и обычный перебор всех конформаций и выбор наиболее стабильной из них займет около  $2^{100}$  пс, или порядка  $10^{10}$  лет [4].

Кроме этого [3–6], синтезируемые в клетке полипептидные цепи, образованные в результате последовательного соединения аминокислотных остатков, представляют собой как бы полностью развернутые белковые молекулы. Для того, чтобы белок приобрел присущие ему функциональные свойства, цепь должна определенным образом свернуться в пространстве, сформировав функционально активную структуру. Несмотря на громадное число теоретически возможных для отдельной аминокислотной последовательности пространственных структур, сворачивание каждого белка приводит к образованию единственной конформации. Таким образом, должна существовать взаимосвязь между аминокислотной последовательностью полипептидной цепи и типом пространственной структуры, которую она образует. Выяснение этой взаимосвязи – достаточно интересная и нерешенная проблема, важность которой трудно переоценить. В настоящее время уже понятно, каким образом закодированы аминокислотные последовательности в структуре ДНК [3–5], однако принципы, определяющие формирование нативной конформации белка, все еще остаются нераскрытыми.

Исследования по изучению сворачивания белка были начаты около полувека назад. Накопленная информация позволила заключить, что образование пространственной структуры – процесс спонтанный, не требующий ни дополнительной информации, ни источника энергии. Предполагалось, что эти положения применимы также и для сворачивания белков внутри клетки. Однако последующие открытия заставили отказаться от такой логики; они показали, что в действительности дело обстоит значительно сложнее. Оказалось, что процесс сворачивания белка не может считаться ни спонтанным, ни энергонезависимым. Благодаря существующей внутри клетки высококоординированной системе регуляции, полипептидная цепочка с самого момента своего появления, сходя с рибосомы, попадает под контроль факторов, которые, не изменяя специфического пути сворачивания (определяемого генетическим кодом), обеспечивают оптимальные условия для реализации быстрого и эффективного образования нативной пространственной структуры.

Представленные ранее данные свидетельствуют о том, что процессы самоорганизации белка, биосинтеза и другие аналогичные процессы происходят при возникновении специфических динамических взаимодействий, не свойственных обычным парным статическим взаимодействиям типа кулоновского или Ван-дер-Ваальсовского. Здесь уместно вспомнить слова А. А. Мигдала, отметившего, что "Красота науки не только и даже

не столько в логической стройности, но в богатстве связей”.

Аналогичная ситуация имеет место и при сворачивании полипептидной цепи внутри клетки [3–6]. Как показали результаты рентгеноструктурного анализа белковых кристаллов, пространственная (третичная) структура каждого белка характеризуется сочетанием элементов вторичной структуры (*a*-спиралей, *b*-тяжей), а также гибких участков полипептидной цепи, называемых петлями. Способность того или иного участка полипептидной цепи образовывать элемент вторичной структуры (например, свернуться в *a*-спираль) зависит от характера аминокислотной последовательности данного отрезка цепи. Таким образом, число и расположение *a*-спиралей, *b*-тяжей и петель по ходу полипептидной цепи различно у разных белков и определяется специфическими взаимодействиями или, как еще говорят, генетическим кодом [3–6]. Этим объясняется потенциальная способность любой полипептидной цепи к спонтанному сворачиванию в уникальную третичную структуру. Согласно современным представлениям, процесс сворачивания имеет иерархическую природу [1–3]: сначала очень быстро (за миллисекунды) формируются элементы вторичной структуры, служащие как бы зародышами для образования более сложных архитектурных мотивов. Второй стадией (также происходящей очень быстро) является специфическая ассоциация некоторых элементов вторичной структуры с образованием супервторичной структуры (это могут быть сочетания нескольких *a*-спиралей, нескольких *b*-цепей либо смешанные ассоциаты данных элементов). Следующим этапом, играющим важную роль для формирования уникальной структуры белка, является образование специфических взаимодействий между участками, значительно удаленными один от другого в аминокислотной последовательности, но оказывающимися чрезвычайно важными в третичной структуре. Полагают [3, 4], что это главным образом гидрофобные взаимодействия, обусловленные сближением неполярных групп и вытеснением молекул воды, расположенных между ними. Для формирования уникальной пространственной структуры каждого белка необходимо, чтобы образовалось определенное (оптимальное в каждом случае) число таких специфических взаимодействий. На пути к достижению оптимального варианта возможны ошибки, образование иных взаимодействий; в этом случае происходит перебор разных вариантов структуры до тех пор, пока не будет достигнут тот единственный вариант, который соответствует функционально активному состоянию данного белка. На пути, ведущем от образования элементов супервторичной структуры к окончательному сворачиванию цепи в компактную глобулу, имеется промежуточная стадия, связанная с формированием основных элементов третичной структуры (специфического сочетания

*a*-спиралей, *b*-тяжей, соединяющих петель) и образованием гидрофобного ядра молекулы. Молекула приобретает пространственную структуру, близкую к структуре нативного белка. Вместе с тем, она еще не обладает присущей данному белку функциональной активностью. Это промежуточное состояние, получившее название "расплавленная глобула", отличается от нативного меньшей степенью упорядоченности структуры, что можно объяснить отсутствием ряда специфических взаимодействий, которое приводит к изменению ориентации подвижных петель, причем в этом случае молекула в целом более лабильна и может образовывать связи с другими молекулами. Таким образом, неспецифическая агрегация может уменьшать число молекул белка, находящихся на правильном пути сворачивания, то есть снижать эффективность этого процесса. Как показали модельные эксперименты, образование "расплавленной глобулы" происходит значительно быстрее, чем ее переход в нативную структуру, а реакция, связанная с перебором разных конформаций, является, таким образом, самой медленной стадией процесса сворачивания. Вероятность агрегации сильно возрастает при повышении температуры и концентрации белка, поэтому эффективное спонтанное сворачивание полипептидной цепи происходит в разбавленных растворах и при низких температурах. Обращаясь к ситуации, имеющей место в реальных системах, необходимо признать, что условия, существующие в клетке, сильно отличаются по этим параметрам. И вместе с тем, в физиологических условиях вновь синтезируемые полипептидные цепи сворачиваются достаточно быстро и эффективно. Следовательно, в клетке должны существовать специальные механизмы и взаимодействия, определяющие процесс сворачивания.

Согласно современным представлениям [3 – 6], клетка располагает по крайней мере двумя типами таких механизмов: основанным на регуляции скорости превращения "расплавленной глобулы" в нативную структуру и обеспечивающим защиту частично свернутого белка от неспецифической агрегации. Как уже отмечалось, стадия превращения "расплавленной глобулы" в нативный белок является самой медленной, ограничивающей скорость всего процесса. Это обусловлено тем, что установление специфических взаимодействий, стабилизирующих нативную конформацию, связано с необходимостью структурных перестроек, происходящих относительно медленно.

Для защиты частично свернутого белка от неспецифической агрегации существуют специальные белки [3 – 5], увеличивающие эффективность сворачивания полипептидной цепи в нативную конформацию. Было обнаружено, что в клетке существует особая категория белков, основной функцией которых является обеспечение правильного характера сворачивания полипептидных цепей в нативную структуру. Эти белки, связываясь

с развернутой или частично развернутой структурой полипептидной цепи, не дают ей образовать неправильные структуры. Они удерживают частично развернутый белок, способствуют его переносу в разные субклеточные образования, а также создают условия для его эффективного сворачивания.

В современной физике достаточно много примеров подобных динамических взаимодействий. В качестве наглядных примеров можно привести поляризационное взаимодействие, пропорциональное  $\alpha/r^4$ , которое возникает при взаимодействии заряженной частицы с нейтральным атомом (эффект Рамзауэра [7]), что приводит к прозрачности различных газов при определенной энергии налетающих электронов, коррелированные пары в теории сверхпроводимости, эффект Ефимова в ядерной, атомной и молекулярной физике [8–17], который возникает при наличии очень малой связи между кластерами системы. Этот эффект [8] основан на том, что причиной существования одних резонансов является существование других. Достаточно много примеров этого эффекта можно найти в атомной и молекулярной физике [8–16], однако наиболее яркий пример этой связи содержится в физике элементарных частиц, где силы между частицами, приводящие к существованию резонансов, создаются в результате обмена частиц в резонансных взаимодействиях, и таким образом резонансы обуславливают сами себя [8].

Эффект Ефимова [8 – 15] является одной из наиболее ярких и интересных иллюстраций отличия системы нескольких тел от системы двух тел. Этот эффект возникает тогда, когда хотя бы в двух парных взаимодействиях трехчастичной системы появляются слабосвязанные состояния с близкой к нулю энергией связи.

Согласно теоретическим [8–13] и экспериментальным оценкам [11–15], подобные состояния возникают в таких системах как  $H_2^-$ ,  $He_3$ ,  $Ar_3$ ,  $Ne_3$ ,  $Kr_3$ ,  $Xe_3$ ,  $Li_3^-$ ,  $Cs_3^-$ ,  $He_2Li$ ,  $He_2Na$ , а также в более сложных системах, например, в описанных выше молекулах белков.

Следует отметить, что молекулярные кластеры, состоящие из атомов гелия, лития, ряда благородных газов, а также молекул биополимеров привлекают внимание как теоретиков, так и экспериментаторов, что связано, в первую очередь, с прикладными исследованиями (сверхтекучесть, сверхпроводимость, бозе-конденсация, лазерная физика – возможность создания лазера на молекуле  $He_2^+$ , создание физиологически активных веществ с заранее заданными свойствами и т.д.), а также с реальной возможностью наблюдения этого необычного квантового эффекта в реальных многочастичных и многокомпонентных системах.

Больше возможностей для прямого экспериментального наблюдения этого эффекта

представляет молекулярная биология, где представлены молекулы биополимеров, состоящие из кластеров (доменов), связанных между собой достаточно малой энергией связи [1–17]. В случае сложных молекул необходимо отметить, что виртуальные уровни в парных подсистемах не приводят к возникновению эффекта Ефимова [8–10]. Это однако не означает, что данный эффект отсутствует в этих системах, т.к. он может быть обусловлен не двухчастичными, а многочастичными виртуальными состояниями, а при использовании кластерного приближения – взаимодействием между кластерами. Таким образом, возникающее специфическое взаимодействие, пропорциональное  $1/R^2$ , является намного более сильным, чем первоначальное затравочное взаимодействие, и в этом случае во всей многочастичной системе возникает иерархия взаимодействий, когда чрезвычайно слабые взаимодействия приводят к более сильным.

Подобная иерархия взаимодействий позволяет объяснить многие эксперименты со сложными физическими, химическими и биологическими системами, когда происходит структурная перестройка внутри этих объектов при чрезвычайно малых возмущениях. Именно это и указывает на существование принципиально новых механизмов структурообразования. Данные механизмы могут реализоваться в системах различной физической, химической и биологической природы, причем когда малое возмущение приводит к структурной перестройке системы, сама структура будет нести явный отпечаток этих возмущений. Например, при описании явления сверхпроводимости возникают образования молекулярного типа, состоящие из отдельных электронных пар (коррелированные электронные пары), эффективные размеры которых  $10^{-4} - 10^{-5}$  см, что на несколько порядков превосходит среднее расстояние между атомами. Таким образом, в пределах одного такого образования могут оказаться сотни обычных молекул. Именно эта особенность играет особую роль в процессах взаимодействия биологических систем с внешним окружением. Здесь необходимо отметить, что устойчивость макроскопических состояний и неустойчивость микроскопических связаны друг с другом, так как условием устойчивости макросостояний является затухание флуктуаций. А с другой стороны, любое микросостояние, особенно маловероятное, это флуктуация на фоне макросостояния. Затухание флуктуаций означает разрушение микросостояния, что может происходить только за счет его неустойчивости. Таким образом, глобальная неустойчивость микросостояний (микроскопический хаос) оказывается необходимым условием макропорядка [4].

Для демонстрации типа химической связи, возникающей в системе, состоящей из нескольких частиц, которая образуется на основе эффекта Ефимова, рассмотрим простей-

шую систему из трех атомов гелия в кластерном приближении, в котором эта система заменяется более простой – а именно системой, состоящей из трех силовых центров – атомов гелия. Известно, что атомы гелия являются бозонами и, таким образом, задача сводится к исследованию динамики трех тождественных попарно взаимодействующих нейтральных бесспиновых частиц. Для решения этой задачи и предлагается использовать математически корректные безмодельные методы квантовой теории рассеяния в системе трех тел [8–11]. Эта реальная физическая система в определенном смысле является простейшей моделью, имитирующей основные свойства молекул биополимеров.

Т а б л и ц а 1

Энергии связи, длина рассеяния, средний радиус и среднеквадратичный радиус для молекулы  $He_2$

Потенциал	$E_{He_2}, mK$	$L_{sl}, \text{Å}$	$\langle r_{He_2} \rangle, \text{Å}$	$\langle r_{He_2}^2 \rangle^{1/2}, \text{Å}$
HFDHE2	-0.8301	89.30	64.21	88.18
HFD-B	-1.6854	88.40	46.18	62.71
HFD-ID	-0.4023	79.10	91.50	126.73
LM2M1	-1.2091	101.10	53.85	73.54
LM2M2	-1.3035	101.25	52.00	70.93
ТТУРТ	-1.3123	100.05	51.84	70.71

Т а б л и ц а 2

Энергии связи, длина рассеяния, средний радиус и среднеквадратичный радиус для молекулы  $He_2$ , рассчитанные в МГУ

Потенциал	$E_{He_2}, mK$	$L_{sl}, \text{Å}$	$\langle r_{He_2} \rangle, \text{Å}$	$\langle r_{He_2}^2 \rangle^{1/2}, \text{Å}$
HFDHE2	-0.8301	123.87	64.20	88.15
HFD-B	-1.6841	88.48	46.18	62.71
HFD-ID	-0.4009	81.15	96.54	125.83
LM2M1	-1.2891	101.10	53.85	73.54
LM2M2	-1.3035	100.25	56.01	71.83
ТТУРТ	-1.3096	100.05	54.75	70.81

Как утверждается в ряде работ [11–12] основные трудности исследования системы  $He_3$  связаны с ее малой энергией связи ( $\sim 1 mK$ ), необычно большим размером возбужденного состояния ( $\sim 150 \text{Å}$ ) и сильным отталкиванием на малых расстояниях.

Однако результаты работ [10, 13], использующих аналогичное трехчастичное приближение для расчета системы  $He_3$ , расходятся с утверждениями, сделанными в [12]. В настоящей работе на основе трехчастичного приближения с парными короткодействующими потенциалами, использованными в [15–17], исследуется следующее:

- определение возможности существования и числа этих необычных состояний в реальной системе  $He_3$ ;
- выяснение роли вида парных потенциалов взаимодействия на характеристики этих состояний;
- оценка влияния отталкивания на малых расстояниях, которое аппроксимируется твердым кором в модели граничных условий (МГУ), на характеристики состояний.

Т а б л и ц а 3

Энергии связи, коэффициент кластеризации, длина рассеяния, средний радиус и среднеквадратичный радиус для молекулы  $He_3$

Потенциал	$E_{He_3}, mK$	$\ f_c\ ^2$	$L_{sl}, \text{Å}$	$\langle r_{He_3} \rangle, \text{Å}$	$\langle r_{He_3}^2 \rangle^{1/2}, \text{Å}$
HFDHE2	-0.1171	0.2094	140	5.65	6.46
HFD-B	-0.1330	0.2717	137	5.48	6.23
HFD-ID	-0.1061	0.1555	139	5.80	6.64
LM2M1	-0.1247	0.2412	132	5.57	6.35
LM2M2	-0.1264	0.2479	131	5.55	6.32
ТТУРТ	-0.1264	0.2487	130	5.56	6.33

Т а б л и ц а 4

Энергии связи, коэффициент кластеризации, длина рассеяния, средний радиус и среднеквадратичный радиус для молекулы  $He_3$ , рассчитанные в МГУ

Потенциал	$E_{He_3}, mK$	$\ f_c\ ^2$	$L_{sl}, \text{Å}$	$\langle r_{He_3} \rangle, \text{Å}$	$\langle r_{He_3}^2 \rangle^{1/2}, \text{Å}$
HFDHE2	-0.1170	0.2095	138	5.65	6.46
HFD-B	-0.1329	0.2717	135	5.48	6.23
HFD-ID	-0.10612	0.1555	134	5.80	6.64
LM2M1	-0.12465	0.2412	130	5.57	6.35
LM2M2	-0.12641	0.2479	131	5.55	6.32
ТТУРТ	-0.12640	0.2487	131	5.56	6.33

Для реализации поставленных целей использовались уравнения Фаддеева с соответствующими граничными условиями, представленные в работах [9, 12], а для численного



решения этих уравнений применялись стандартные методы решения [9–14, 18]. В качестве парных потенциалов взаимодействия применялись потенциалы HFDHE2, HFD-B, HFDID, LM2M1, LM2M2, ТТУРТ [16] с соответствующими параметрами [17], которые достаточно детально воспроизводят основные параметры соответствующих молекул.

Т а б л и ц а 5

Энергии связи, коэффициент кластеризации, длина рассеяния, средний радиус и среднеквадратичный радиус для молекулы  $He_3^*$

Потенциал	$E_{He_3^*}, mK$	$\ f_c^*\ ^2$	$L_{sl}, \text{Å}$	$\langle r_{He_3^*} \rangle, \text{Å}$	$\langle r_{He_3^*}^2 \rangle^{1/2}, \text{Å}$
HFDHE2	-1.6653	0.9077	134	55.26	66.25
HFD-B	-2.743	0.9432	135	48.33	57.89
HFD-ID	-1.0612	0.8537	140	62.75	75.38
LM2M1	-2.1550	0.9283	129	51.53	61.74
LM2M2	-2.2713	0.9319	131	50.79	60.85
ТТУРТ	-2.2806	0.9323	131	50.76	60.81

Т а б л и ц а 6

Энергии связи, коэффициент кластеризации, длина рассеяния, средний радиус и среднеквадратичный радиус для молекулы  $He_3^*$ , рассчитанные в МГУ

Потенциал	$E_{He_3^*}, mK$	$\ f_c^*\ ^2$	$L_{sl}, \text{Å}$	$\langle r_{He_3^*} \rangle, \text{Å}$	$\langle r_{He_3^*}^2 \rangle^{1/2}, \text{Å}$
HFDHE2	-1.6765	0.9078	135	56.22	67.11
HFD-B	-2.7458	0.9439	135	48.31	58.00
HFD-ID	-1.1061	0.8597	136	62.87	76.13
LM2M1	-2.2585	0.9323	132	52.41	62.04
LM2M2	-2.2801	0.9319	131	50.79	61.05
ТТУРТ	-2.2885	0.9339	131	51.23	60.89

Результаты расчетов энергий связанных состояний систем  $He_2$ ,  $He_3$  и  $He_3^*$  как с учетом, так и без учета твердого кора представлены в таблицах 1–6. Для интерпретации геометрических характеристик молекулы  $He_3$  на рис. 1–3 представлены результаты расчетов функции плотности [8, 11], причем для возбужденного состояния  $He_3^*$  эта функция имеет два максимума, что соответствует линейной структуре системы  $He_3^*$  (рис. 1, 2). Это соответствует тому, что в возбужденном состоянии третья частица с большой долей вероятности находится между двумя другими и подобное состояние как бы соответствует двум объединенным парным подсистемам. Этот вывод подтверждается

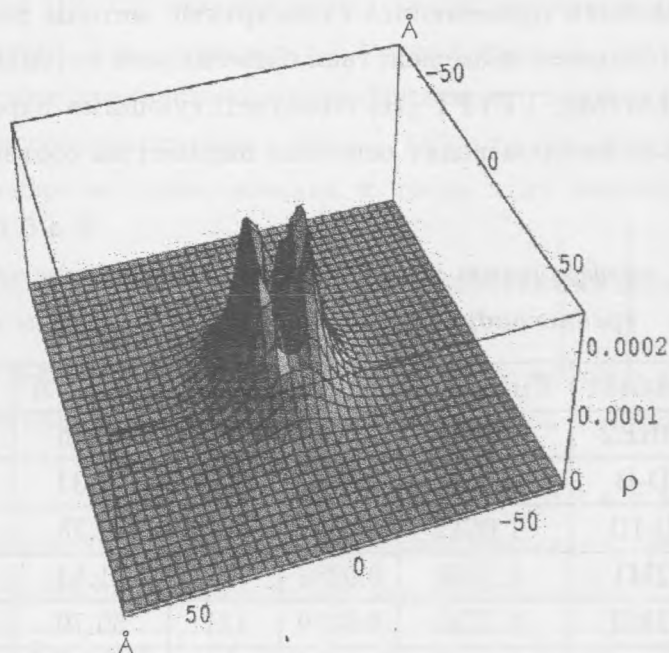


Рис. 1. Пространственное изображение функции плотности  $\rho$  основного состояния молекулы  $He_3$ .

расчетами коэффициента кластеризации [10–13]. Результаты этих расчетов показывают, что в возбужденном состоянии  $He_3^*$  преобладают двухчастичные состояния, а в основном состоянии роль этих состояний незначительна. Линии уровня волновых функций представлены на рис. 3. Отметим, что масштабы на рис. 3а, который соответствует основному состоянию системы  $He_3$ , и рис. 3б, соответствующий возбужденному состоянию, различны. В случае основного состояния система  $He_3$  образует почти равносторонний треугольник, а в случае возбужденного – один из атомов находится достаточно далеко от двух других, причем именно эта конфигурация соответствует условиям возникновения эффекта Ефимова в трехчастичной системе, когда в одной из парных подсистем длина рассеяния достаточно большая. Отметим, что размер основного состояния системы  $He_3$  меньше размера молекулы гелия  $He_2$ . Однако размер первого возбужденного состояния трехчастичной системы  $He_3^*$  уже на порядок превышает размеры  $He_2$ . Похожие образования возникают при описании явления сверхпроводимости, когда возникают образования молекулярного типа, состоящие из отдельных электронных пар (коррелированные электронные пары), эффективные размеры которых ( $10^{-4} - 10^{-5}$ ) на несколько порядков превосходят среднее расстояние между атомами. В пределах одного такого образования могут оказаться сотни обычных молекул.

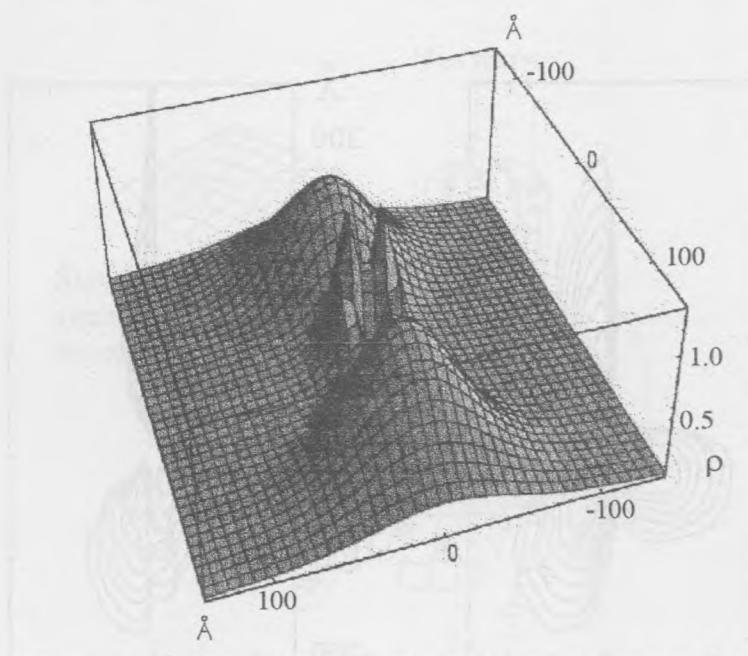


Рис. 2. Пространственное изображение функции плотности  $\rho$  возбужденного состояния молекулы  $Ne_3$ .

Т а б л и ц а 7

Энергии связи молекул благородных газов, рассчитанные с применением HFD-B потенциала и полученные экспериментально, а.е.  $10^{-6}$

Энергия/Молекула	$Ne_2$	$Ar_2$	$Kr_2$	$Xe_2$	$Rn_2$
$E_{теор}$	178	394	619	854	9268
$E_{эксп}$	135	446	629	874	—

Т а б л и ц а 8

Энергии связи основного и первого возбужденного состояния тримеров молекул благородных газов для HFD-B потенциала, а.е.  $10^{-6}$

Молекула	$Ne_3$	$Ne_3^*$	$Ar_3$	$Ar_3^*$	$Kr_3$	$Kr_3^*$	$Xe_3$	$Xe_3^*$	$Rn_3$	$Rn_3^*$
$E_B$	398	330	1278	1215	1885	1811	2509	2438	30875	30801

Аналогичная структура возникает при расчетах основных состояний систем  $Ne_3$ ,  $Ar_3$ ,  $Kr_3$ ,  $Xe_3$ ,  $Li_3^-$ ,  $Cs_3^-$ ,  $^{12}C_3$ , результаты расчета которых в рассматриваемом приближении с потенциалом HFD-B представлены в таблицах 7, 8.

Таким образом, в рассматриваемом приближении результаты расчетов наглядно

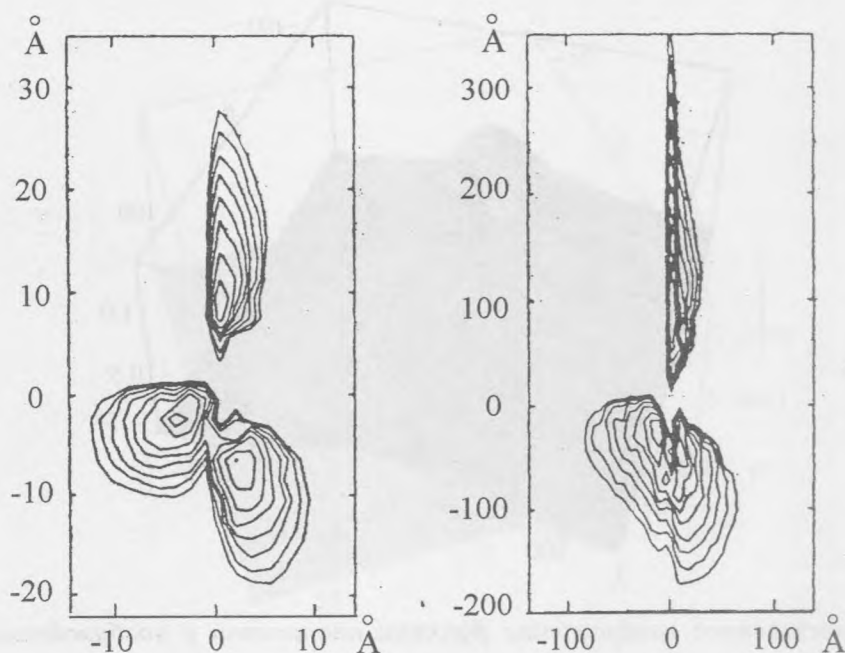


Рис. 3. Линии уровня плотности распределения основного состояния  $He_3$  (а) и возбужденного состояния  $He_3^*$  (б). Сечения, параллельные плоскости  $x, y$ .

свидетельствуют о существовании эффекта Ефимова в системе  $He_3$ , причем число возможных уровней не более двух.

Кроме этого расчеты показывают что:

- состояния Ефимова обладают максимально возможной пространственной симметрией, имеют специфические квантовые числа, что позволяет их надежно идентифицировать и не спутать с уровнями какой-либо другой природы;
- многочастичные силы не влияют на эффект;
- заряд частиц влияет на эффект и для заряженных частиц эффект проявляется менее ярко, чем для нейтральных;
- влияние масс частиц на эффект значительно, причем при изменении соотношения масс частиц резко изменяется динамика движения. Имеется три характерных режима – режим одинаковых частиц, режим тяжелого центра и режим двух тяжелых и одной легкой частицы (молекулярный режим);
- наличие спинов затрудняет существование эффекта.

Аналогичные расчеты в случае более сложных систем, таких как  $Li_3^-$ ,  $Cs_3^-$ , дают следующие результаты: размер основного состояния  $20 - 40 \text{ \AA}$ , время жизни порядка



Рис. 4. Схема роста спиралевидной структуры.

$10^6$  сек, а число уровней  $10^3 - 10^4$  [10, 19].

Таким образом, можно заключить, что в рассматриваемом приближении вид парных потенциалов взаимодействия, а также учет твердого кора в модели граничных условий не оказывает существенного влияния на результаты расчетов – все эти необычные состояния определяются специфическими свойствами парных потенциалов.

Применение представленного метода для расчетов реальных молекул биополимеров в настоящее время связано со многими трудностями, основные из которых следующие: отсутствие надежных спектроскопических данных о кластерах, отсутствие каких-либо данных о потенциалах взаимодействия между этими кластерами в отличие от двухатомных и многоатомных молекул [17] и т.п. Однако в некоторых частных случаях можно сделать некоторые оценки. Можно доказать [20, 21], что при определенных условиях биополимеры, состоящие из однородных элементов, образуют спиральные структуры. Это подтверждается и экспериментально [22] по сублимации замороженных водных растворов органических соединений, включая аминокислоты (мономеры белков), нуклеотиды (мономеры ДНК, РНК) и их смеси. В этих экспериментах [22] при концентрациях растворов больше чем  $10^{-2}$  г/моль/л образуются пористые остат-

ки – матрицы из кристаллов растворенных веществ, а при меньших концентрациях структура матриц существенно меняется и они имеют вид одинаково ориентированных трубчатых нитей. Образование этих нитей происходит при замораживании растворов, которое сопровождается вытеснением примесных компонент фронтом образующегося льда, а флуктуации плотности компонент приводят к сдвигам в кристаллической решетке льда – дислокациям, образующим своеобразные ступени [22], причем по мере кристаллизации ступень закручивается, что схематично представлено на рис. 4. Эксперименты показали, что сшивка мономеров в нитях может происходить в процессе их сборки, т.к. обнаружено, что замораживание водных растворов аминокислот определенной концентрации при облучении УФ ( $\lambda = 250 - 300 \text{ nm}$ ) инициирует взаимодействия между компонентами и приводит к реакциям синтеза биополимеров. Расчеты, основанные на предлагаемой модели, показали, что взаимная ориентация мономеров в цепях, осуществляемая при самосборке, реализуется именно за счет специфического многочастичного взаимодействия, описанного выше, – молекулы подстраиваются друг к другу, стремясь занять положение с минимумом потенциальной энергии. В результате сборки цепей из *L*-аминокислот роль матрицы играют нуклеотиды и наоборот. Таким образом, благодаря многочастичным динамическим взаимодействиям устанавливается однозначная взаимосвязь между молекулами – генетический код. Проведенные на основе предлагаемых моделей оценки показывают, что:

- аминокислоты и нуклеотиды образуют свои индивидуальные цепи и практически нет ограничений для сборки больших ( $10^6 - 10^9 \text{ атомов}$ ) молекул нуклеиновых кислот,

- возникает чередование в отдельных цепях участков с периодическим и аperiodическим характером следования мономеров различных видов, причем характер включения мономеров в цепь определяется различием скоростей перемещения молекул на различных ступенях дислокации при замораживании,

- в самостоятельные цепи распределяются не только нуклеотиды и аминокислоты, но и их изомеры, если они присутствовали в исходном растворе. Это доказывает, что *L*-аминокислоты, вращающие плоскость поляризации света влево, образуют в пространстве цепь в виде правой винтовой спирали и находятся вблизи правой винтовой спирали из нуклеотидов, а *D*-аминокислоты, образующие левую винтовую спираль, располагаются поперек спирали нуклеотидов. Этот факт доказывает естественное разделение стереоизомеров в процессе эволюции [23]. Эти результаты – формирование упорядоченных спиралевидных структур из молекул примесей – одномерная сборка – имеют прямое отношение к проблеме возникновения жизни. Практическое же значение этого явления

связано с проектированием биополимеров с заранее заданными свойствами и возможностью построения на их основе различных технических элементов биоэлектроники.

Таким образом, представленные результаты наглядно показывают, что существует реальная возможность объяснения многих экспериментальных данных из области молекул биополимеров, исходя из основных принципов квантовой механики. Кроме этого, анализ геометрических конфигураций этих необычных состояний молекулярных систем показывает, что в подобных состояниях возникает выделенная степень свободы – например, в случае  $He_3$  это практически линейная конфигурация – и, таким образом, именно по этой выделенной координате реализуется наиболее эффективным образом обмен энергии. Этот простейший пример показывает, что и в случае более сложных молекул, например белков, энергия, сконцентрированная в области активного центра, передается также по выделенной координате. Таким образом, выделенная степень свободы оказывается связанной с координатой реакции, причем способы реализации этой связи могут быть совершенно различными [7, 19–22].

Работа выполнена при поддержке Научного фонда Китайской Народной Республики (грант NSF 19734030), Академии Наук Тайваня (грант NSC 85-212-M-007-009), Совместного научного фонда Израиля и США, и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 98-02-17266, 01-02-16075).

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Б у т л е р о в А. М. Избранные работы по органической химии, М., АН СССР, 1951; В е с е л о в М. Г. Элементарная квантовая теория атомов и молекул, М., Физматлит, 1962; К р а с н о в К. С. Молекулы и химическая связь, М., Высш.шк., 1984.
- [2] Г р а ф у т и н В. И. и др. Препринт ИТЭФ 19-01, М., 2001; Б е р г м а н А. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N9, 9 (2002).
- [3] Г а л з и т с к а я О. В., И в а н к о в Д. Н., Ф и н к е л ь ш т е й н А. В. Молекулярная биология, **35**, 708 (2001); Ф и н к е л ь ш т е й н А. В., П т и ц и н О. Б. Физика белка: курс лекций., М., Книжный дом "Университет", 2002, 376 с.
- [4] Ч е р н а в с к и й Д. С., Ч е р н а в с к а я Н. М. Белок-машина биологические макромолекулярные конструкции, М., Янус-К, 1999; К а р и м о в А. Р., Щ е г л о в В. А. Препринт ФИАН N 20, М., 2000.
- [5] Н а г р а д о в а Н. К. Внутриклеточная регуляция формирования нативной структуры белка, Соросовский образовательный журнал, N 6, 32 (1996);

- Наградова Н. К. Внутриклеточная регуляция формирования нативной структуры белка, в кн. "Современное естествознание, Энциклопедия", т. 8, Молекулярные основы биологических процессов, М., Энциклопедия, 2001; Шульц Г., Ширмер Р. Принципы структурной организации белков. М., Мир, 1982;
- Наградова Н. К., Муронец В. И. Мультидоменная организация ферментов. Итоги науки и техники. Сер. биологическая химия. М., **38**, 162 (1991); Ptitsyn O. B. In: Protein Folding / Creighton, T. E., ed. N.Y., Pergamon Press, 1992, P. 243; Freeman W. H.; Agard D. A. Science, **260**, 1903 (1993); Hartl F.-U., Hlodan R., Langer T. Trends in Bioch. Sci., **19**, 20 (1994).
- [6] Зефирова О. Н., Зефиров Н. С. Успехи химии, **70**, 382 (2001).
- [7] Ramsauer P., Kollath R. Ann. der Phys., **12**, 529 (1932).
- [8] Efimov V. Nucl. Phys., **A362**, 45 (1981); **A378**, 581 (1982); Phys. Rev., **C47**, 1876 (1993); Vugalter S. A., Zislina G. M. Dokl. AN SSSR, **267**, 784 (1982); Ефимов В. Влияние резонансов в парных силах на спектр уровней трех частиц, М., МИФИ, 1973; Ребане Т. К. ЯФ, **61**, N 1, 61 (1998).
- [9] Faddeev L. D., Merkuriev S. P. Quantum scattering theory for several particles systems, Kluwer, London, 1993.
- [10] Позднеев С. Nova Science Publ., **212**, 99 (1996); Позднеев С. Phys. Lett., **B125**, 355 (1983); Позднеев С. А. Применение квантовой теории рассеяния в системе трех тел для расчетов различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики, М., Янус-К, 2001, 412 с.; Позднеев С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 4, 19 (2001); Позднеев С. А. ЖЭТФ, **117**, N 1, 35 (2000).
- [11] Fedorov D. V. et al. Phys. Rev., **C50**, N 5, 2372 (1994); Cobis A. Phys. Lett., **B424**, 1 (1998); Yuan J., Lin C. D. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **31**, L637 (1998); Gonzalez-Lezana T. et al. J. Chem. Phys., **110**, N 18, 1015 (1999); Phys. Rev. Lett., **82**, N 8, 1648 (1999); Janzen A. R., Aziz R. A. J. Chem. Phys., **103**, N 22, 33 (1995); Tang K. T. et al. Phys. Rev. Lett., **74**, N 9, 1546 (1995).
- [12] Motovilov A. K., Kalganova E. A., Sofianos S. A. J. Phys. B: At. Mol. Phys., **31**, 1279 (1998).
- [13] Rudnev V., Yakovlev S. Chem. Phys. Lett., **22**, 97 (2000); Physics of Atomic Nuclei, **63**, N 1, 61; N 2, 271; N 3, 402; N 5, 830 (2000).
- [14] Frederico T. et al. Phys. Rev., **A60**, N 1, R9 (1999); Hahn Y. Phys. Rev.,



- A60**, N 3, 2139 (1999); Nielsen E. et al. Phys. Rev. Lett., **82**, N 14, 2844 (1999); Bedaque P. F. et al. Phys. Rev. Lett., **82**, N 3, 463 (1999); Ionescu R. A., Nategan C. Europhysics Lett., **45**, N 3, 269 (1999).
- [15] Lon F. et al. J. Chem. Phys., **104**, N 2, 1151 (1996); Schollkopf W., Toennies J. P. J. Chem. Phys., **104**, N 2, 1155 (1996); Rama Krishna M. V., Whaley K. V. Phys. Rev. Lett., **64**, 1126 (1990); Hegerfeldt G. C., Kohler T. Phys. Rev. Lett., **84**, N 15, 3215 (2000).
- [16] Janzen A. R., Aziz R. A. J. Chem. Phys., **79**, 4330 (1979); **94**, 8047 (1991); **103**, N 22, 9626 (1995); Mol. Phys., **61**, 1487 (1987); Tang K. T. et al. Phys. Rev. Lett., **74**, N 9, 1546 (1995); Pozdnev S. Laser Chemistry, Biophysics and Biomedicine ICONO'95, p. 92, St. Pb., 1996; Magenan H. et al. Theory of Intermolecular forces, N.Y., Pergamon Press, 1971; Meath W. J. et al. Intermolecular forces, London, B. Pullman, 1978.
- [17] Huber K. P., Gerzberg G. Constants of Diatomic Molecules, New Jersey, 1979.
- [18] Kantorovich L. V., Krilov V. I. Approximate method of higher analysis. Fizmatgiz, Moscow, 1962.
- [19] Pen'kov F. M. Phys. Rev., **62**, 044701-1 (2000).
- [20] Сент-Дьёрдьи А. Биоэлектроника. М., Мир, 1971;  
Блюменфельд Л. А. Проблемы биологической физики. М., Наука, 1977;  
Волькенштейн М. В. Биофизика. М., Наука, 1988; Скулачев В. П. Эволюция биологических механизмов запасаения энергии, Соросовский образовательный журнал, N 5, 11 (1997); Рубин А. Б. Биофизика. М., Высш. шк., **1**, **2**, 1987; Шайтан К. В. Молекуляр. биология, **26**, 264 (1992); **28**, 670 (1994).
- [21] Козлов Н. Н. и др. Препринт ИПМ N 42, М., 2002; N 4, 2001; N 74, 2001; N 80, 2001.
- [22] Каймаков Е. А. Биофизика, **25**, 7 (1980); Препринт ФТИ 1735, С.-Петербург, 1999.
- [23] Аветисов В. А., Гольданский В. И. УФН, **166**, N 8, 873 (1996); Лобзин В. В., Чечеткин В. Р. УФН, **170**, N 1, 57 (2000).

Поступила в редакцию 2 сентября 2002 г.

После переработки 12 мая 2003 г.