

КВАНТ БИОФИЗИКИЙН СУДАЛГААНЫ ЗАРИМ АСУУДЛУУД

Т.Гун - Аажав

МУИС, Биологийн факультет, Биофизикийн тэнхим

Түлхүүр үг : Квант биофизик, фотосинтезийн гэрлийн шат, цацрагийн мутаци, булчингийн агшилт

Товч утга: Дээд ургамлын фотосинтез, цацрагийн мутаци, булчингийн агшилтын квант физикийн судалгааны зарим үр дүнг өгүүлээд биомакромолекул ба тэдгээрийн комплексийн физик - химийн судалгааны квант химийн аргуудыг боловсронгуй болгохын чухлыг тэмдэглэв.

ОРШИЛ

Квант онолыг үндэслэгчдээс эхлээд манай үеийн нэрт физикчид квант физикийг биологит хэрэглэх асуудалд аль эртнээс анхаарсаар ирцгээсэн байна [1,2,3]. Квант биофизикийн судалгаанд квант химийн энгийн Хюккелийн аргаас эхлээд өөртөө зохицох орны арга хүртэлх олон аргууд хэрэглэгдэж байна[4,5,6,].

Бид энэ ажилд фотосинтезийн биофизик, удамшил хувьслын болон цацрагийн үйлчлэлийн биофизик ба булчингийн агшилтын биофизик зэрэг биофизикийн үндсэн салбаруудад квант химийн аргыг хэрэглэж байгаа өнөөгийн байдал болон энэ чиглэлийн судалгааны өмнө тавигдаж байгаа онол, арга зүйн зарим асуудлыг авч үзэх зорилт тавилаа.

Фотосинтезийн биофизикийн гэрлийн шатны судалгааны тулгуур асуудал нь фотосинтезлэх системд гэрэл шингэж өдөөгдсөн төлөв үүсэх, өдөөгдсөн төлвийн энерги гэрэл цуглуулах хлорофиллийн олонлогоос урвалын төв рүү шилжих ба цэнэг салалт бож хүчилтөрөгч ялгаран электрон зөөх гинжээр электрон зөөгдөж, фотосинтезийн фосфоржилт явагдах ба улмаар ангижирсан НАДФ*Н үүсэх зэрэг олон физик ба физик химийн процессийн судлалын цогц юм. Энэ судалгаанд молекулын спектр судлалын болон математик загварчлалын аргууд өргөн хэрэглэгдэж байгаагийн зэрэгцээгээр сүүлийн үед квант химийн тооцооны аргууд хүчтэй орж ирж байна [7,8,9].

А.К.Кукушкин, Д.В.Степин нар [7] дээд ургамалын хлоропластын мембран дахь хоёр фотосистемийн хооронд электрон зөөгч пластохинон, пластогидрохинон ба пластохиноны

$$\sum_s^n F_{rs} c_{js} = \sum_s^n S_{rs} c_{js} \epsilon_j$$

дан ба дахин ангижирсан молекулуудын электрон түгэлт буюу атом дээрх цэнэгүүд болон холбоосын эрэмбүүдийг өөртөө зохицох орны тэг ойролцооллод Хюккелийн аргаар боджээ.

Тэр тохиолдолд Хартри – Фокийн өөртөө зохицох орны тэгшитгэл нь Руутааны тэгшитгэлд шилждэг.

Энд Руутааны тэгшитгэл нь тэг дефференциал огтлолцлын ойролцооллод дараах хэлбэртэй болдог.

$$F_{rs} = h_{rs} + \sum_t^N \sum_u^N P_{rs} [(rs/tu) - 1/2(rt/su)],$$

$$h_{rs} = \int \varphi_r h \varphi_s dr,$$

$$(rs/tu) = \int \varphi_r(r) \varphi_s(r) \left(\frac{e^2}{r-r'} \right) \varphi_t(r') \varphi_u(r') dr dr'$$

$$F_{rr} = \alpha + (1/2)P_{rr}(rr/rr) + \sum (P_{ss} - Z_s)(rr/ss)$$

$$F_{rs} = \beta_{rs} - (1/2)P_{rs}(rr/ss)$$

Энд α_r - Хюккелийн ойролцооллын кулоны интегралын аналог ба r - төвийн иончлолын потенциал, β_{rs} - резонансын интегралын аналог бөгөөд r ба s төвийн холбоосын бат бэх, (rr/ss) - электрон хоорондын түлхэлцлийн хоёр электронт интеграл

$$(rr/ss) = \alpha_r - A_r$$

α_r ба A_r - иончлолын ба электрон нэгтгэх потенциалууд.

Гетер атомт молекулын хувьд α_r , β_{rs} интегралуудын туршлагын параметруудыг ашиглан пластохинон ба пластогидрохиноны элетроны түгэлт (атом дээрх цэнэг) болон холбоосын эрэмбийн утгуудыг бодож, нэгдүгээрт, хиноны атомууд дээрх электроны түгэлтийн утгуудаас ФСII –ын акцепторын комплексын 2 валентат төмрийн ионы нэгэн үүрэг нь Q_B - хиноны молекулыг фотосистемийн дэд нэгжтэй холбох үүрэгтэй, хоёрдугаарт пластохинон ба гидропластохиноны харгалзах холбоосын эрэмбүүд ба диполийн моментуудын утгаас пластохиноноос гидропластохинонд шилжих үед молекулын

конформаци өөрчлөгдөх бүрэн боломжтой байна гэсэн чанарын дүгнэлтэд хүрчээ.

Бидний энэ ажилд авч үзсэн хоёр дахь бүлэг асуудал нь нуклейн хүчлийн азотлог сууриудын зохицолт хосуудын электрон индекс, болон тэдгээрээр удамшил хувьсал, химийн ба цацрагийн мутацийн механизмыг тайлбарлах зэрэг квант генетикийн тооцоот бодлогууд юм [10,11,12].

В.И.Данилов, В.И. Куприевич, О.В.Шрамко, нар [10] конфигурацийн харилцан үйлчлэлийн аргыг ашиглан пиримидиний сууриудын атом дээрх цэнэг анхдагч синглет ба триплет төлвүүдийн энергийн утгуудыг тодорхойлж энергийн түвшний $i \rightarrow k$ шилшилтэнд харгалзах өөрчлөлтийг

$$\Delta E(i \rightarrow k) = \varepsilon_k - \varepsilon_i + \sum_{\mu\nu} (2\theta c_{\mu i} c_{\nu i} c_{\mu k} c_{\nu k} - c_{\mu i}^2 c_{\nu k}^2) \gamma_{\mu\nu}$$

томъёогоор боджээ. Энд $\gamma_{\mu\nu}$ - хоёр төвт Кулоны интеграл ба θ нь триплет төлөвт тэгтэй, синглет төлөвт нэгтэй тэнцүү байна.

Энэ тооцооноос УФ туяаны мутаци нь туннелийн эффектээр үүсэх мутациас олон дахин их гэсэн дүгнэлтэнд хүрчээ. Мөн судлаачид хүчилтөрөгч бүхий орчин дахь УФ цацрагийн үйлчлэлээр пиримидиний сууриудын гидрохэтисэл үүсэх боломжтойг харуулсан ба пиримидиний сууриудын гидрохэтислийн задралын хурд нь

Тимин < урацил << цитозин гэсэн дэс дараалалтай болохыг тогтоожээ.

Мөн бид нуклейн хүчлийн хос азотлог сууриудын электрон индексүүд ба туйлшралын коэффициентүүдийг Хюккелийн аргаар бодож хос сууриудын байгууламж дахь хасах цахилгаант чанар (электроотрицательность) ихтэй азот ба хүчилтөрөгчийн атомууд дээрх цэнэгийн нягт нүүрстөрөгчийн атомынхаас их байгаа бөгөөд атом - атомын ба холбоос - холбоосын туйлширлийн коэффициентүүд ихэвчлэн сөрөг байна гэсэн дүгнэлтэд хүрсэн [13].

Булчингийн агшилтын квант онолын судалгааны тулгуур бүтээлүүд нь А.С. Давыдовын ажлууд юм [14,15,16]. Булчингийн агшилтын үед химийн энерги буюу АТФ (аденозин трифосфат) – ийн макроэргийн холбооны энерги нь механик энерги болон хувирах хувирал явагддаг бөгөөд амьд эс, эдэд химийн энергийг шууд механик энерги болгон хувиргадаг байгууламж нь ганцхан булчин юм. Булчингийн агшилтын онолын судалгааны үндсэн

асуудал нь АТФ – ын гидролизын үед ялгарах химийн энерги хэрхэн механик энерги болон хувирдаг болохын физик үндсийг тайлбарлах явдал юм.

АТФ–ын гидролизын энергээр булчингийн уургийн молекулын полипептидийн гинж коллектив цочролд орох ба тийм системийг физикт солитон хэмээн нэрлэдэг. Солитоны шилжилт нь өдөөгдлийн энергийг дамжуулах ба солитон V хурдтай шилжих үед зөөгдөх энерги нь

$$E_V = E_0 + 1/2 m_{эф} V^2$$

томъёогоор илэрхийлэгдэнэ. E_0 - солитоны дотоод энерги,

$$E_0 = \varepsilon - D - 2J - \frac{\chi^4}{3\omega^2 J}$$

$$m_{эф} = \frac{h^2}{2JR^2} + \frac{4\chi^4 \left(1 + \frac{3}{2}s^2 - \frac{1}{2}s^4\right)}{3\omega^2 JV_a^2 (1-s^2)^3}$$

$m_{эф}$ - солитоны эффектив масс,

Энд ε - коллектив өдөөгдлийн энерги, D - деформацийн харилцан үйлчлэлийн энерги, J -молекул хоорондын резонансын харилцан үйлчлэлийн энерги, R -атом хоорондын зай, χ , s , ω -полипептидийн гинжийн параметрууд болно.

АТФ – ийн гидролизын үед ялгарах энерги 0.54 эВ. Энэ энерги нь молекулын электроны энергийг өдөөхөд хүрэлцэхгүй бөгөөд харин пептидийн бүлгийн Амид I хэлбэлзлэлийг өдөөхөд (≈ 0.21 эВ) бүрэн хүрэлцээтэй. Энэ хэлбэлзлийн диполийн момент нь хүрэлцээтэй их ($\approx 0.3D$) бөгөөд уургийн молекулын гинжийн коллектив өдөөлтийг явуулах резонансын харилцан үйлчлэлийг бүрэн нөхцөлдүүлж чадна. Иймээс солитоны шилжилтийн дүнд булчингийн уургийн полипептидийн гинж деформацид орж булчингийн агшилт, сулралтыг нөхцөлдүүлдэг гэж үзэх бүрэн үндэстэй юм.

Дээр тэмдэглэсэн хэдэн ажлаас үзэхэд биофизикийн нэлээд олон асуудлын чанарын үзүүлэлтүүдийг квант онолын аргаар тайлбарлаж байгаа боловч уул үзэгдлүүдийн тоон үзүүлэлтүүд болон молекул механизм бүрэн гүйцэт тайлбарлагдаагүй байна. Үүний гол шалтгаан нь өнөөдөр квант

биофизикийн судалгаанд хэрэглэгдэж байгаа квант химийн тооцооны аргууд нь харьцангуй хялбар системүүдэд үйлчилж байгаад оршино [16,17,18].

Энэ бүхнээс үзэхэд биологийн процессийн молекул механизмыг квант онолоор тайлбарлахын тулд макромолекул ба түүний комплекст явагддаг процессийг бичих шинэ арга, аргачлалыг боловсруулах болон судалгааны хүрээг өргөтгөн үйлчлэлийн потенциал, нервийн импульс, психофизикийн үзэгдлүүдийн молекул механизмыг тайлбарлах нь квант биофизикийн судалгааны өнөөгийн тулгамдсан асуудал болоод байна.

АШИГЛАСАН НОМ, ЗОХИОЛ

1. Шредингер Э. Что такое жизнь с точки зрения физика. М.: Атомздат, 1972. (Анхны хэвлэл нь англи хэлээр 1942 онд гарсан)
2. Бор Н. Физическая наука и проблема жизни. В кн./ Атомная физика и человеческое познание. М. : Изд-во иностранной литературы, 1961
3. Давыдов А.С. Биология и квантовая механика Киев. : Наукова Думка, 1979
4. Пульман Б. , Пульман А. Квантовая биохимия М. : Мир. 1966
5. Стрейтвизер Э. Теория молекулярных орбит для химиков – органиков. М.: Мир, 1965
6. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии, М. : Мир, 1972
7. Кукушкин А.К., Степин Д.В., Электронная структура пластохинонов и перенос электронов между фотосистемами в высших растениях //Биофизика Т.44, вып1, с.102-111, 1999
8. Васильева Л.Ю. Квантово – химическая модель механизма выделения кислорода при фотосинтезе. // Биофизика. Т.44, вып.3 с.389 – 394, 1999
9. Чернавская Н.М., Черновский Д.С. Туннельный транспорт электронов в фотосинтезе. М.: Изд-во МГУ, 2000
10. Данилов В.И., Куприевич В.А., Шрамко О.В., Изучение π -электронной структуры Уотсон-Криковских пар оснований ДНК методом самосогласованного поля в полуэмпирическом приближении, // Биофизика, Т.12, вып2, с.186-192, 1967
11. Данилов В.И. , Квенцель Г.Ф. Электронные представления в теории точенных мутаций. Киев.: Наукова Думка, 1971

12. Сухоруков Б.И., Полтев З.И., Блюменфельд Л.А. Оптические свойства и молекулярное строение нуклеиновых кислот и их компонентов // Биофизика, Т.9, вып.2, с. 266, 1964
13. Нарандалай Д., Энхбаяр П., Гун-Аажав Т. Нуклейн хүчлийн хос азотлог сууриудын электрон индексийн квант химийн судалгаа. // МУИС ЭШ-ийн бичиг №6 (136), Х.133 – 144, 1998
14. Давыдов А. С. Элементарное возбуждения типа солитонов в биологии // Методологические и теоретические проблемы биофизика. М.: Наука, с.243 – 255 1979
15. Давыдов А.С. Влияние электрон- фонноного взаимодействия на движение электронов в одномерной молекулярной цепи. // Теорет. и мат. физика, Т.40, вып.3, с.408-421, 1979
16. Давыдов А.С. Солитоны в биоэнергетике, Киев.: Наукова Думка, с.57- 82, 1986
17. Васильева Л.Ю. Структура и механизм функционирования активных центров биологически важных комплексов d-металлов: Автореф. Дис...д-ра физ.-мат.наук. М.: МГУ, с.23 1998.
18. Долгушин М.Д., Эвристические методы квантовой химии, М.:УРСС, 2001

Abstract

Some results of quantum biophysical research on the Light stage of higher plant photosynthesis, the radiation mutation and the muscle contraction were considered. The significance of improvement of quantum chemistry methods for physical and chemical studies of biomacromolecules and their complexes was proposed.