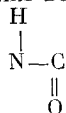


Академик АН УССР А. С. ДАВЫДОВ, А. Д. СУПРУН

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СОКРАЩЕНИЯ БЕЛКОВЫХ МОЛЕКУЛ

В работе развивается квантовая теория одного из механизмов сокращения белковых молекул при их возбуждении.

Сократительные белки представляют полипептидные цепи аминокислотных остатков. Они свернуты в α -спирали вследствие возникновения водородных связей между кислородом и водородом пептидных групп



первого и четвертого, второго и пятого и т. д. аминокислотных остатков; таким образом, вдоль спирали образуются три цепи водородных связей. При изменении состояния пептидных групп (ПГ) изменяется величина водородных связей и тем самым изменяется шаг спирали. Для количественного вычисления этого изменения рассмотрим одну из трех цепей водородных связей.

Пусть $\mathbf{r}_n$ — радиус-вектор, определяющий положение центра n -й ПГ, $n = 1, 2, \dots, N$, $N \sim 200-300$. Тогда $R_n = |\mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_n|$ — расстояние между двумя соседними ПГ. Пусть потенциальная энергия их взаимодействия (когда они находятся в основном состоянии) имеет вид

$$U_0 = \sum_n u_0(R_n), \quad u_0(R) = C/R_n^s - A/R_n^3, \quad (1)$$

где C , A и s — параметры теории. Минимуму (1) соответствуют равновесные расстояния

$$R_0 = (sC/3A)^\sigma, \quad \sigma = (s-3)^{-1}. \quad (2)$$

Предположим, что ПГ в белковой молекуле может переходить в возбужденное состояние с энергией ε и этому переходу соответствует электрический дипольный момент, направленный вдоль цепи водородной связи*. Введем паулевские операторы рождения B_n^+ и уничтожения B_n возбуждения на группе номера n . Тогда при некоторых фиксированных значениях R_n оператор энергии возбуждения всей цепочки будет иметь вид

$$H = \sum_n \{[\varepsilon + D(R_n)] B_n^+ B_n + M(R_n) [B_n B_{n+1}^+ + B_n^+ B_{n+1}]\}, \quad (3)$$

где $D(R) = -\alpha/R^3$ — изменение статической энергии взаимодействия двух соседних ПГ; $M(R) = -\gamma/R^3$ — энергия резонансного диполь-дипольного взаимодействия между соседними группами.

Для упрощения вычислений в качестве граничных условий приняты условия цикличности Борна — Кармана. Тогда $R_N = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_N|$ и сумма по n распространяются на значения от 1 до N . Если основное состояние цепочки $|0\rangle$, то при фиксированных R_n возбужденные состояния характеризуются функциями

$$\Psi = \sum_n a_n B_n^+ |0\rangle, \quad (4)$$

* Мы не детализируем характер возбужденного состояния. В частности, это может быть внутримолекулярное валентное колебание $\text{C}=\text{O}$ (амид 1) с частотой 1600—1700 cm^{-1} .

определяемыми наборами комплексных чисел a_n , удовлетворяющих условию

$$\sum_n a_n^* a_n = v \ll N, \quad (5)$$

где v — число синфазных возбуждений отдельных групп.

Каждому набору чисел a_n и расстояний R_n будет соответствовать энергия возбуждения

$$E(\{a_n\}, \{R_n\}) = \sum_n \{[\varepsilon + D(R_n)] a_n^* a_n + M(R_n) [a_n^* a_{n+1} + a_n^* a_{n+1}]\}. \quad (6)$$

При фиксированном наборе $\{a_n\}$ выражение (6) является дополнительной к (1) потенциальной энергией для ПГ. Из условия минимума выражения

$$U = U_0 + E(\{a_n\}, \{R_n\}) \quad (7)$$

находим значения новых равновесных расстояний в цепочке:

$$\rho_n = R_0 \{1 + \kappa a_n^* a_n + \eta [a_n^* a_{n+1} + a_n^* a_{n+1}]\}^{-\sigma}. \quad (8)$$

где $\kappa = \alpha / A$, $\eta = \gamma / A > 0$, $\eta < \kappa < 1$.

Для определения значений a_n , минимизирующих (7), подставим в (7) значения (8) и сохраним слагаемые порядка не выше κ , η , κ^2 . Тогда получим функционал

$$U(\{a_n\}) = v\varepsilon - (3\sigma + 1)\kappa v w_0 - N w_0 - \Lambda \sum_n (a_n^* a_{n+1} + a_n^* a_{n+1}) - G \sum_n (a_n^* a_n)^2, \quad (9)$$

где

$$w_0 = -u_0(R_0); \quad G = \frac{3}{2}(3\sigma + 1)\sigma \kappa^2 w_0, \quad \Lambda = (3\sigma + 1)\eta w_0 \quad (10)$$

— параметры, не зависящие от n . Поэтому энергии, соответствующие минимуму (9) при условии (5), можно классифицировать числами

$$k = \frac{2\pi}{N} j, \quad j = 0, \pm 1, \dots, \pm N/2. \quad (11)$$

Рассматривая только малые значения k (длинноволновое приближение), можно в (9) перейти к непрерывной модели*.

Положим

$$a_n \Rightarrow a(x) = \varphi(x) \exp(ikx). \quad (12)$$

Тогда (9) преобразуется к виду

$$U(k, \{a(x)\}) = -N w_0 + v(\varepsilon - 2\Lambda) + v \hbar^2 k^2 / 2m^* - (3\sigma + 1)\kappa v w_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \int \varphi(x) \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} dx - G \int \varphi^4(x) dx, \quad (13)$$

где

$$m^* = \hbar^2 / 2\Lambda = 2\hbar^2 / \Delta E, \quad \Delta E = 4\Lambda. \quad (14)$$

Минимум (13) при условии (5) определяется нелинейным дифференциальным уравнением

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + 2G\varphi^3 - \chi\varphi = 0. \quad (15)$$

Его решение имеет вид

$$\varphi(x) = \sqrt{v\mu/2} / \operatorname{ch}(\mu\xi), \quad (16)$$

$$\xi = x - x_0, \quad \mu = 2Gv / \Delta E, \quad \chi = G^2 v^2 / \Delta E. \quad (17)$$

* Этот переход осуществляется подобно тому, как это сделано в работе (4).

В длинноволновом приближении в (8) можно положить $[a_n a_{n+1}^* + a_n^* a_{n+1}] \approx 2a_n^* a_n$, тогда при учете (16) получаем равновесные расстояния между ПГ в цепочке

$$\rho(\xi) \approx R_0 \left(1 - \frac{\sigma(\kappa + 2\eta) G v^2}{\Delta E \cdot \text{ch}^2(\mu \xi)} \right). \quad (18)$$

Следовательно, в точке $x = x_0$ цепочки, которая перемещается вдоль цепи с групповой скоростью $v_g = \frac{k \cdot \Delta E}{2\hbar} v$, происходит максимальное уменьшение расстояния между ПГ на величину

$$\Delta \rho_{\max} = \sigma(\kappa + 2\eta) G v^2 R_0 / \Delta E. \quad (19)$$

Существенное уменьшение расстояний между ПГ происходит на протяжении цепочки

$$\Delta \xi = \pi \Delta E / (2vG).$$

При этом общая длина цепочки

$$L = N R_0 - \sigma v R_0 (\kappa + 2\eta).$$

Подставив (16) в (13), находим энергию возбуждения (над $-Nw_0$) цепочки для фиксированного $k \ll 1$

$$E(k) = v \left[\varepsilon - \frac{\Delta E}{2} - (3\sigma + 1) \kappa v w_0 \right] + \frac{1}{4} \Delta E \cdot k^2 v - \frac{G^2 v^3}{3 \Delta E}. \quad (20)$$

Таким образом, коллективность возбуждения приводит к энергии возбуждения (20), которая значительно меньше энергии возбуждения отдельных ПГ.

Институт теоретической физики
Академии наук УССР
Киев

Поступило
8 XII 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ А. С. Давыдов, Phys. Stat. Sol., 36, 241 (1969).