УДК 621.373.826.038.823

МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ИНФОРМАЦИОННЫМИ БИОМАКРОМОЛЕКУЛАМИ

П. П. Гаряев, М. Ю. Маслов, С. А. Решетняк, В. А. Щеглов

Представлена теоретическая модель влияния электромагнитного излучения на динамику информационных биомакромолекул. Выявлена роль коллективных эффектов в биополимерах и их резонансных взаимодействий с модулированным по амплитуде электромагнитным излучением.

Функции информационных биомакромолекул (ДНК, РНК, белков) имеют генетико-биохимические свойства, определяющиеся интенсивностью воздействия на биосистему внешнего и внутреннего электромагнитного излучения (ЭМИ). Поглощаемая при этом энергия излучения идет, в частности, на преодоление потенциального энергетического барьера, существующего между различными конформационными состояниями информационных биомакромолекул (ИБМ) [1]. Необходимыми условиями осуществления данного процесса являются электрическая и магнитная активность соответствующих степеней свободы ИБМ и достижение ими достаточно высокого уровня возбуждения. Определенным основанием для рассматриваемой модели первичных механизмов действия ЭМИ в микроволновом диапазоне на ИБМ *in vitro – in vivo* служит информация о спектрах "мягких мод" белков и нуклеиновых кислот [2, 3].

Цель настоящего исследования – теоретический анализ динамики ИБМ в присутствии ЭМИ и определение наиболее эффективных условий для реализации высоковозбужденных состояний ИБМ.

Рассмотрим простейшую одномерную цепочку мономеров, связанных между собой диполь-дипольным ближним взаимодействием. Отметим, что подобная модель, как правило, используется при изучении динамики ДНК. Предполагается, что взаимодействие с полем излучения $f_0 \cos \omega t$ приводит к возбуждению дипольно-активных колебаний мономеров, характеризуемых собственными координатами x_k, частотой ω_0, затуханием

λ. В нашем случае мономеры – это канонические нуклеотидные пары, содержащие азотистые основания ДНК (аденин – тимин, гуанин – цитозин). С учетом собственного ангармонизма мономеров и взаимодействия между ними, потенциальную функцию биополимерной цепочки в присутствии ЭМИ можно записать в виде

$$V = -\sum_k x_k f_0 \cos \omega t + \sum_k \left[\frac{\omega_0^2 x_k^2}{2} + \frac{\xi_x}{3} x_k^3 \right] + \sum \frac{\Omega_0^2}{4} [(x_k - x_{k-1})^2 + (x_k - x_{k+1})^2] +$$

$$+ \sum_k \frac{\xi_{xx}}{3} [(x_k - x_{k-1})^3 + (x_k - x_{k+1})^3] + ... \qquad (1)$$

С учетом (1) уравнения движения имеют вид

$$\ddot{x}_k + 2\lambda \dot{x}_k + \omega_0^2 x_k = f_0 \cos \omega t + \frac{\Omega_0^2}{2} (x_{k-1} - 2x_k + x_{k+1}) - \Phi(x_{k-1}, x_k, x_{k+1}), \qquad (2)$$

где

$$\Phi = \xi_x x_k^2 + \xi_{xx} [(x_k - x_{k-1})^2 + (x_k - x_{k+1})^2].$$

В линейном приближении система (2) приобретает простую форму

$$\ddot{x}_k + 2\lambda \dot{x}_k + \omega_0^2 x_k = \frac{\Omega_0^2}{2} (x_{k-1} - 2x_k + x_{k+1}) + f_0 \cos \omega t \qquad (3)$$

($k = 1, 2, ...N$, N – число мономеров).

Используя стандартные методы матричной алгебры (например, [4]), находим решение системы (3) для вынужденных колебаний, представляющих наибольший интерес:

$$x_k = \sqrt{\frac{2}{N+1}} f_0 \sum_{m=1}^{N} \frac{S_m \sin[mk\pi/(N+1)]}{\sqrt{(\omega^2 - \nu_m^2)^2 + \lambda^2 \omega^2}} \cos(\omega t + \varphi_m), \qquad (4)$$

где введены обозначения для частот коллективных колебаний ν_m, парциальных коэффициентов S_m и фаз φ_m ($m = 1, 2, ...N$). Соответственно,

$$\nu_m^2 = \omega_0^2 + \Omega_0^2 \sin^2[m\pi/2(N+1)] \qquad (5)$$

$$S_m = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \frac{\sin(\pi m/2) \sin[\pi N/2(N+1)]}{\sin[\pi m/2(N+1)]} \qquad (6)$$

$$\mathrm{tg}\varphi_m = 2\lambda\omega/(\omega^2 - \nu_m^2). \qquad (7)$$

В записи (4) четко выявлены резонансы на коллективных модах (5). Ясно, что резонансное воздействие внешнего ЭМИ именно на этих частотах представляется наиболее эффективным. Из (6) следует, что величина S_m при четных m обращается в нуль, следовательно, число резонансов $r = [N/2]$, т.е. вдвое меньше числа мономеров цепочки. Это обстоятельство прямо связано с симметрией задачи. Нетрудно определить расстояния между частотами коллективных мод:

$$\nu_{m+2}^2 - \nu_m^2 = \Omega_0^2 \sin[\pi/(N+1)] \sin[\pi(m+1)/(N+1)]$$

из чего следует, что при $m \simeq 1$ и $m \simeq N$ спектр сгущается, а при $m \simeq N/2$ – разрежается. С физической точки зрения наиболее четкие резонансы должны проявляться для m, близких к величине $N/2$.

Допустим далее, что внешний сигнал ЭМИ промодулирован по амплитуде:

$$f = f_0(1 + 2\gamma \cos \Omega t) \cos \omega t. \tag{8}$$

Легко показать, что в случае амплитудной модуляции возникают дополнительные возможности реализации резонансного воздействия на ИБМ:

$$\begin{cases} \nu_m = \omega & - \text{стандартный случай} \\ \nu_m = \omega - \Omega & - \text{стоксовы резонансы} \\ \nu_m = \omega + \Omega & - \text{антистоксовы резонансы.} \end{cases} \tag{9}$$

Таким образом, при амплитудной модуляции число возможных резонансных реализаций увеличивается по сравнению с монохроматическим полем втрое ($r = 3[N/2]$).

Если решение (4) линейной системы принять за нулевое приближение, то можно найти первое приближение, учитывающее ангармонизм (см. [2]). Для этого в правую часть (2) следует подставить решение (4) и вновь проинтегрировать (2) с новой правой частью. Эта процедура громоздка и поэтому не приводится. Отметим, что нелинейность в (2) носит квадратичный характер. Это приводит к тому, что в правой части появится не зависящий от времени постоянный член и члены, пропорциональные второй гармонике. Этим обусловлены дополнительные резонансы $\nu_m = 2\omega$, связанные со второй гармоникой, что может играть существенную роль в активных воздействиях на ИБМ с помощью модулированного по амплитуде ЭМИ. Резонансы на второй гармонике могут осуществляться как за счет ангармонизма самих мономеров, так и взаимодействия между ними.

С учетом ангармонизма и амплитудной модуляции (8) очевидно, что число резонансов существенно расширяется:

$$\nu_m = \{\Omega, 2\omega, 2\omega \pm \Omega, 2(\omega \pm \Omega)\}.$$

Таким образом, теоретический анализ показал, что при взаимодействии внешних (искусственных) и внутренних (естественных) ЭМИ с ИБМ резонансы носят коллективный характер, а это может коррелировать с когерентными состояниями биосистем, постулированными в [1]. При воздействии монохроматического ЭМИ на ИБМ число резонансов будет вдвое меньше числа мономеров (при этом спектр не эквидистантен). Амплитудная модуляция ЭМИ увеличивает число возможных резонансных реализаций за счет стоксовых и антистоксовых частот. Учет нелинейности системы ИБМ существенно увеличивает число резонансных реализаций ЭМИ, что дает возможность для двухквантовых резонансов.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Frolich H., Phys. Letts, **26A**, 402 (1968); **29A**, 153 (1972).

[2] Painter P. S. et al., Biopolymers, **21**, 1469 (1982); **20**, 243 (1981).

[3] Urabe H. et al., Biopolymers, **21**, 2477 (1982); J. Chem. Phys., **82**, 533 (1985).

[4] Ораевский А. Н., Степанов А. А., Щеглов В. А., ЖЭТФ, **65**, 1837 (1973).

Поступила в редакцию 7 декабря 1995 г.