

УДК 621.373.826.038.823

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ИНФОРМАЦИОННЫМИ БИОМАКРОМОЛЕКУЛАМИ. "АНТЕННАЯ" МОДЕЛЬ

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

Теоретически исследовано влияние электромагнитного излучения на информационные биомacroмолекулы с активным центром. В рамках развитой "антенной" модели проанализированы возможности по резонансному управлению состоянием активного центра биообъекта.

В данной работе анализируется динамика взаимодействия электромагнитного излучения (ЭМИ) с одним из важнейших классов информационных биомacroмолекул (ИБМ), а именно, с биообъектами, содержащими в своем составе активные центры (атомы металлов). Отметим, что функционирование ИБМ во многом определяется степенью возбуждения их активного центра (АЦ). К числу наиболее важных ИБМ относятся гем (функция дыхания) и хлорофилл (фотосинтез). Сюда же относится широкий спектр их производных – гемосодержащие, кобамидные коферменты, бактериохлорофиллы, фитохромы и т.д. Структурная основа их (порфириновое ядро) образуется из комплексов, содержащих в качестве АЦ атомы Mg, Fe, Zn, Ni, Co и Ag [1]. При этом точная роль металлов в усвоении и передаче внешних и внутренних квантов ЭМИ до сих пор не ясна даже для высокоспециализированных антенноподобных ИБМ – хлорофиллов и фитохромов, не говоря уже о гемоглобине, миоглобине и гемосодержащих ферментах.

В гемосодержащих белковых структурах атомы металлов (АЦ) окружены четырьмя симметрично расположенными пирольными кольцами и соединены с ними координационными связями (рис. 1).

Задача о влиянии ЭМИ на динамику ИБМ с АЦ исключительно сложна. Поэтому на начальном этапе неизбежны упрощения. Рассматривая гем-структуры (более широко, полипептидные и полинуклеотидные цепи, образующие некоторое пространство вокруг

атомов металлов, включая щелочные и щелочно-земельные элементы в ИБМ), логично предположить, что резонансное взаимодействие с ЭМИ приводит к возбуждению дипольно-активных колебаний мономеров цепочек, которые, в свою очередь, индуцируют колебания АЦ и тем самым могут приводить систему в другое конформационно-динамическое состояние. Некоторые оценки, связанные с "антенным" эффектом, приведены в [2]. В рамках "антенной" модели исследуем симметричную квазикольцевую (например, четырехпиррольный цикл гем-содержащих белков), где в центре расположен атом металла (как правило, ион металла). Этот центр связан дипольно-активным взаимодействием с мономерами (аминокислотами), окружающими гем белка. Мономеры считаются одготипными.

Обозначим координатные смещения мономеров через x_1, \dots, x_N (N – число мономеров), а смещение активного центра через y . Для потенциальной функции имеем

$$\begin{aligned}
 V(x_k, y) = & \sum_{k=1}^N \left\{ \left[\frac{1}{2} \omega_x^2 x_k^2 + \frac{1}{3} \xi_x x_k^3 \right] + \frac{1}{2} \omega_{xx}^2 [(x_k - x_{k-1})^2 + (x_k - x_{k+1})^2] \right\} + \\
 & + \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{\xi_{xx}}{3} [(x_k - x_{k-1})^3] + (x_k - x_{k+1})^3 + \left[\frac{1}{2} \omega_{xy}^2 (y - x_k)^2 + \frac{\xi_{xy}}{3} (y - x_k)^3 \right] \right\} + \quad (1) \\
 & + \left[\frac{1}{2} \omega_y^2 y^2 + \frac{\xi_y}{3} y^3 \right] - \sum_{k=1}^N x_k f_0 \cos \omega t.
 \end{aligned}$$

Первый член отвечает собственным колебаниям (с учетом ангармоничности) мономеров, 2-й и 3-й – ближним взаимодействиям между ними, 4-й описывает взаимодействия активного центра с мономерами, 5-й член описывает собственные колебания активного центра, 6-й член отвечает взаимодействию ЭМИ ($f = f_0 \cos \omega t$) с ансамблем мономеров ("антенной").

С учетом (1) уравнения движения записываются стандартным образом (линейное приближение):

$$\ddot{x}_k + \lambda \dot{x}_k + \omega_1^2 x_k - \omega_0^2 y = \frac{\Omega_0^2}{2} (x_{k-1} - 2x_k + x_{k+1}) + f(t) \quad (2.1)$$

$$\ddot{y} + \lambda \dot{y} + \omega_2^2 y - \omega_0^2 x = 0, \quad (2.2)$$

где $\omega_0^2 = \omega_{xy}^2$, $\omega_1^2 = \omega_x^2 + \omega_{xy}^2$, $\omega_2^2 = \omega_y^2 + N\omega_{xy}^2$, $\Omega_0^2 = 2\omega_{xx}^2$, λ – феноменологически введенный коэффициент затухания, $x = \sum_{k=1}^N x_k$ – общая координата ансамбля мономеров. С учетом ангармонизма в правых частях (2.1) и (2.2) добавляются соответственно члены

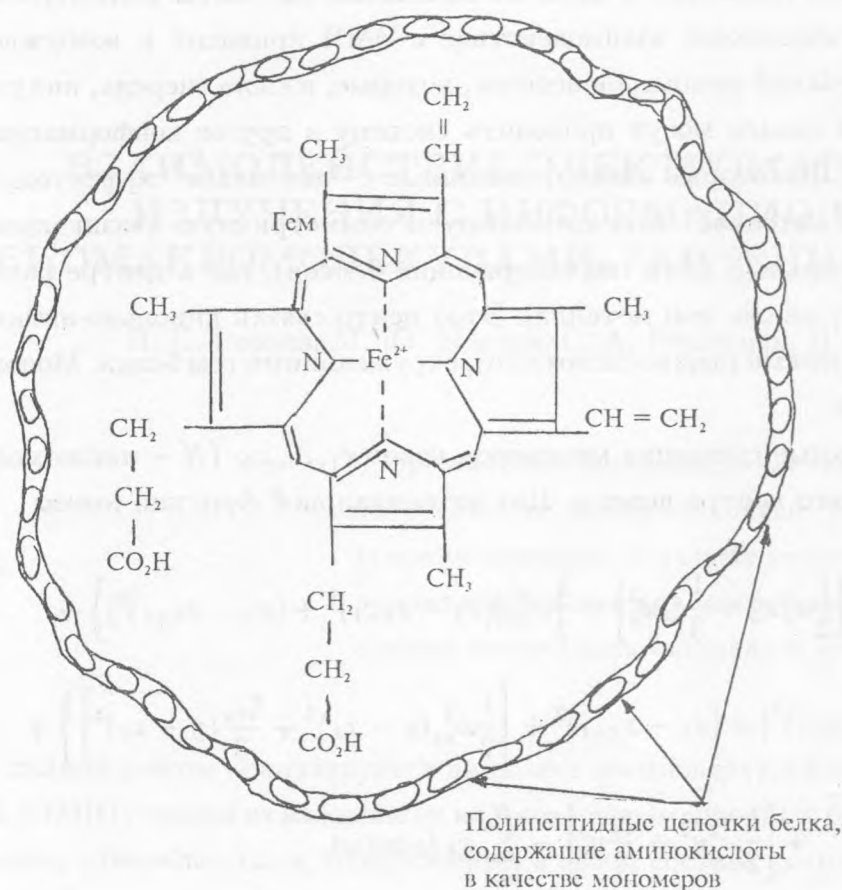


Рис. 1. Упрощенная схема гемоглобина - белка, содержащего в качестве активного центра ион Fe^{2+} и четыре симметрично расположенных вокруг иона пиррольных остатка ("антенна"). Стрелками обозначены полипептидные цепочки белка, содержащие аминокислоты в качестве мономеров.

$$\Phi_1 = -\xi_x x_k^2 - \xi_{xx} [(x_k - x_{k-1})^2 + (x_k - x_{k+1})^2] + \xi_{xy} (y - x_k)^2,$$

$$\Phi_2 = -\xi_y y^2 - \sum_{k=1}^N \xi_{xy} (y - x_k)^2. \quad (3)$$

Суммирование по индексу k в (2) дает простейшую систему

$$\begin{aligned}\ddot{x} + \lambda\dot{x} + \omega_1^2 x - N\omega_0^2 y &= Nf(t), \\ \ddot{y} + \lambda\dot{y} + \omega_2^2 y - \omega_0^2 x &= 0.\end{aligned}\quad (4)$$

Решение однородного уравнения (4) ищем в виде $y = \exp(Kt)$. Соответствующее (4) характеристическое уравнение имеет вид

$$(K^2 + \lambda K + \omega_1^2)(K^2 + \lambda K + \omega_2^2) = N\omega_0^4. \quad (5)$$

Его решение (при этом полагаем $\omega_0^2 < \frac{\omega_1\omega_2}{\sqrt{N}}$ и $\lambda^2 < \omega_1^2 + \omega_2^2$) записывается в виде

$$K_{1,2,3,4} = -\frac{\lambda}{2} \pm i\sqrt{\Omega_{1,2} - \frac{\lambda^2}{4}},$$

где введены коллективные частоты

$$\Omega_{1,2} = \left\{ \frac{1}{2}(\omega_1^2 + \omega_2^2) \pm \left[\frac{1}{4}(\omega_1^2 - \omega_2^2) + N\omega_0^4 \right]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (6)$$

Вынужденные колебания АЦ описываются выражением

$$\begin{aligned}y &= y_0 \cos(\omega t + \phi), \\ y_0 &= \frac{N\omega_0^2 f}{\sqrt{(\omega^2 - \Omega_1^2)^2(\omega^2 - \Omega_2^2)^2 + \omega^2 \lambda^2 [\omega^2 \lambda^2 + (\omega^2 - \Omega_1^2)^2 + (\omega^2 - \Omega_2^2)^2]}}.\end{aligned}\quad (7)$$

В условиях коллективного резонанса ($\omega = \Omega_1, \Omega_2$) достигается максимальная амплитуда

$$y_{0\max} = \frac{N\omega_0^2 f_0}{\omega \lambda \sqrt{\omega^2 \lambda^2 + (\Omega_2^2 - \Omega_1^2)^2}}. \quad (8)$$

Из (8) следует, что наибольший эффект резонансной раскачки АЦ достигается при больших числах мономеров "антенны" и коэффициентов связи между мономерами и АЦ, при наименьших значениях коэффициента затухания и частотной расстройки коллективных мод.

По найденному $y(t)$ система (2.1) позволяет восстановить "хореографию" (динамику вынужденных колебаний) отдельных мономерных единиц. Используя стандартные методы линейной алгебры, как и в [3], находим

$$x_k = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{k=1}^N \frac{s_m \sin \frac{mk\pi}{N+1} [f_0 \cos(\omega t + \delta_{m1}) + y_0 \cos(\omega t + \delta_{m2})]}{\sqrt{(\omega^2 - \nu_m^2)^2 + \lambda^2 \omega^2}}, \quad (9)$$

где

$$\nu_m^2 = \omega_1^2 + \Omega_0^2 \sin \frac{m\pi}{2(N+1)}, \quad s_m = \frac{\sin(m\pi) \sin \frac{m\pi N}{N+1}}{\sin \frac{m\pi}{2(N+1)}}.$$

Как видим, для мономеров появляются собственные коллективные частоты ν_m , которые зависят, как и для коллективных частот АЦ, от связей между мономерами и последних с АЦ, но не зависят от числа мономеров N . Это число влияет лишь на амплитуды парциальных колебаний.

Рассматривая случай амплитудной модуляции внешнего сигнала (частота модуляций Ω) с учетом ангармонизма колебаний (см. [3]) и опуская громоздкие выкладки, можно сделать выводы: указанные эффекты создают дополнительные возможности по эффективному резонансному воздействию на АЦ биомакромолекулы ($\Omega_{1,2} = \omega \pm \Omega$; Ω ; 2ω ; $2\omega \pm \Omega$; $2(\omega \pm \Omega)$).

В заключение отметим одно нетривиальное обстоятельство, связанное с тем, что на основе "антенной" модели, в принципе, возможно создание лазерных систем *in vitro* на ИБМ, обладающих АЦ. В качестве таковых, в частности, могут выступать мембраны, цитоскелет, фотосинтетический аппарат, митохондрии, клеточное ядро, хромосомы и белок-синтезирующая система. Накачка реализуется через периферийные мономеры (донорные объекты) с последующей передачей их энергии АЦ (акцептору), который может служить излучающей лазерной частицей. Заметим также, что в случае реализации этой идеи возникает принципиально новая методология спектрального изучения биоструктур, оперирующих в организме энергией и информацией, и, кроме того, сами представления о энергоинформационном "метаболизме" могут претерпевать существенные изменения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. М. Мир, 1987.
- [2] Сериков А. А. и др. В сб. трудов под ред. В. П. Шестопалова. АН УССР, ИРЭ, Киев, Наукова Думка, с. 41 - 50.