

# Вестник МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 1—1962

Р. ХОФФМАНН

## ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ СПИРАЛЬНЫХ ПОЛИМЕРОВ

Рассматривается теория возбужденных состояний спиральных полимеров в трех приближениях: 1 — приближение Гайтлер — Лондона; 2 — множественное возбуждение в представлении вторичного квантования; 3 — смешивание молекулярных состояний и множественных возбуждений в представлении вторичного квантования. В каждом приближении получены общие выражения для волновых функций, энергетических уровней и дипольного момента перехода. Рассматривается изменение интенсивностей переходов вследствие полимеризации. Результаты сравниваются с другими работами о хроматическом эффекте в нуклеиновых кислотах.

### Введение

В настоящей работе мы рассматриваем разные подходы к теоретической трактовке возбужденных состояний спиральных полимеров. Предполагается, что мономерные единицы, составляющие полимер, содержат хромофорные группы, оптические свойства которых только немного меняются вследствие полимеризации. Хромофором мы называем определенную группу атомов в молекуле мономера, ответственную за характеристическое поглощение света молекулой при  $\lambda \gtrsim 1800 \text{ \AA}$ . Предполагая, что волновые функции мономеров известны и что полимер может быть рассмотрен (для выяснения его оптических свойств) как слабозаимодействующая совокупность мономерных единиц определенной геометрии, мы построим волновые функции полимера. Применяются методы теории экситонов; в частности, результаты исследований В. М. Аграновича [1, 2], которые позволяют с помощью представления вторичного квантования учесть одновременное возбуждение нескольких экситонов и смешивание молекулярных состояний.

Наши результаты могут быть применены к таким полимерам, как нуклеиновые кислоты (где хромофорами являются пурины и пиримидины) и изотактические полистиролы (обнаруженные Натта [3]), в которых хромофором является ароматическое кольцо. Полученные результаты сравниваются с результатами работы Тиноко [4].

### Формулировка проблемы

Рассмотрим правую спираль, построенную из одинаковых хромофоров. Пусть центры хромофоров лежат на спирали радиуса  $R$  с шагом винтовой линии  $d/m$ . Назовем единичной ячейкой полимера наименьший

участок длины  $d$ , содержащий  $P$  хромофоров, повторением которого можно образовать весь полимер. Число всех хромофоров равно  $N$ , и  $N$  принимается большим, чтобы можно было пренебречь эффектами концов полимера. Выберем систему координат следующим образом: ось  $z$  вдоль оси полимера, ось  $x$  через центр любого заданного мономера. Введем индекс  $n$  — номер единичной ячейки, индекс  $\alpha$  — номер хромофора внутри единичной ячейки. Так, мономер  $s$  может быть представлен через пару индексов  $(n, \alpha)$ , где

$$s = nP + \alpha - N/2,$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, N/P - 1,$$

$$\alpha = 0, 1, 2, \dots, P - 1.$$

$N/P$  четное.

Пусть ось  $x$  пересекает хромофор  $s = 0$ .

При таком выборе координат положение мономера  $s$  задается вектором

$$\vec{r}_s = \{R \cos 2\pi ms/P, R \sin 2\pi ms/P, ds/P\}.$$

Вектор расстояния между хромофорами  $o$  и  $s$

$$\vec{r}_s - \vec{r}_o = \{R(\cos 2\pi ms/P - 1), R \sin 2\pi ms/P, ds/P\},$$

$$|\vec{r}_s - \vec{r}_o| = (4R^2 \sin^2 \pi ms/P + d^2 s^2/P^2)^{1/2}. \quad (1)$$

Обозначим компоненты дипольного момента электронного перехода в каждом мономере с помощью

$$\vec{P}_s = P_s \{ \cos(\Phi + 2\pi ms/P) \sin \Theta, \sin(\Phi + 2\pi ms/P) \sin \Theta, \cos \Theta \}, \quad (2)$$

где  $\Theta$  и  $\Phi$  углы, образованные дипольным моментом нулевого хромофора соответственно с осью  $z$  и с осью  $x$ .

### Приближение Гайтлер — Лондона

Пусть волновые функции и энергии основного состояния хромофора соответственно  $\Phi_s^0$  и  $E_s^0$  и первого возбужденного состояния  $\Phi_s^f$  и  $E_s^f$  известны. Пренебрегая обменом электронами, запишем волновую функцию, соответствующую возбуждению хромофора номер  $s$ , в виде

$$X_s^f = X_{n\alpha}^f = \Phi_0^0 \Phi_1^0 \dots \Phi_s^f \dots \Phi_{N-1}^0.$$

Тогда волновые функции полимера можно записать в виде

$$\Psi_{(k,\mu)}^f = N^{-1,2} \sum_{n=0}^{N/P-1} \sum_{\alpha=0}^{P-1} \exp[2\pi i k(n + \alpha/P)] B_\alpha(\mu) X_{n\alpha}^f,$$

где  $\mu$  — индекс, который имеет  $P$  значений,  $k = \xi/N$ , где  $\xi$  — целые числа в интервале  $-N/2P < \xi \leq N/2P$ .  $B_\alpha(\mu)$  определяются обычно из векового уравнения, но в нашем случае можно определить  $B_\alpha(\mu)$  из свойств симметрий спирали. Для  $k=0$  волновые функции преобра-

зуются как базисы для неприводимых представлений фактор-группы кристалла. При этом

$$\Psi^{f(0,\mu)} = N^{-1/2} \sum_n \sum_a B_a(\mu) X_{na}^f.$$

Фактор-группа полимера изоморфна к группе вращения  $C_p$ . Группа  $C_p$  имеет известные неприводимые представления

$$A, B, E_1, E_2, \dots, E_{(p-2)/2}, \text{ если } P \text{ четное,}$$

$$A, E_1, E_2, \dots, E_{(p-1)/2}, \text{ если } P \text{ нечетное.}$$

Из таблицы характеров группы  $C_p$  находим

$$B_a(\mu) = \exp [2\pi i \alpha \mu m / P],$$

где  $\mu = 0$  принадлежит представлению  $A$ ,  $\mu = \pm 1$  — представлению  $E_1$ , дважды вырожденному,  $\mu = \pm 2$  — представлению  $E_2$  и т. д. Дипольные переходы с основного состояния возможны только на уровни при  $k = 0$ . Теперь возникает дополнительное правило отбора при  $k = 0$ , переходы в фактор-группе разрешены только на уровни  $\mu = 0$ ,  $\mu = \pm 1$ . Переход на  $\mu = 0$  поляризован вдоль оси полимера, а переходы на  $\mu = \pm 1$  поляризованы перпендикулярно оси полимера [5].

Таким образом, волновые функции возбужденных уровней полимера будут

$$\Psi^{f(k,\mu)} = N^{-1/2} \sum_n \sum_a \exp [2\pi i (kn + k\alpha/P + \alpha\mu m/P)] X_{na}^f.$$

Соответствующие энергии

$$E^{f(k,\mu)} = E_0^f + 2 \sum_{\substack{n \\ n,\alpha+l\beta}} \sum_a \cos 2\pi (k(n-l) + (k/P + \mu m/P)(\alpha - \beta)) V_{na,l\beta}^{(of;fo)}, \quad (3)$$

где

$$V_{na,l\beta}^{(of;fo)} = \int \Phi_{na}^{(1)} \Phi_{l\beta}^{f(2)*} V_{12} \Phi_{na}^f \Phi_{l\beta}^{(2)} d\tau_{12}. \quad (4)$$

Дипольный момент перехода с основного состояния на уровень  $k = 0, \mu$  ( $\mu = 0, \pm 1$  разрешены)

$$\vec{P}(\mu) = N^{-1/2} \sum_n \sum_a \exp [2\pi i \alpha \mu m / P] \vec{P}_{na},$$

где  $\vec{P}_{na} = \int \Phi_{na}^0 \vec{P} \Phi_{na}^f d\tau$  — дипольный момент перехода в хромофоре.

$V$  обычно разлагается в ряд и в диполь-дипольном приближении (4) можно записать в виде

$$V_{na,l\beta}^{(of;fo)} = \frac{\vec{P}_{na} \vec{P}_{l\beta}}{|r_{na} - r_{l\beta}|^3} \frac{3 \{ \vec{P}_{na} (r_{na} - r_{l\beta}) \} \{ \vec{P}_{l\beta} (r_{na} - r_{l\beta}) \}}{|r_{na} - r_{l\beta}|^5}. \quad (5)$$

Теперь, выбирая произвольное  $l\beta$ , соответствующее  $s = 0$ , пользуясь уравнениями (1) и (2), можно подставить (5) в (3) и получить общую формулу, определяющую смещение энергетических уровней

$$E_{(k,\nu)}^f - E_0^f = \frac{|P_{n\alpha}|^2}{4R^3} \sum_{s=1} \cos 2\pi (ks/P + s\mu m/P) \times \\ \times \left\{ \frac{\sin^2 \Theta \cos 2\pi sm/P + \cos^2 \Theta}{[\sin^2 \pi sm/P + d^2 s^2 / 4P^2 R^2]^{3/2}} - \right. \\ - \frac{3[-4R^2 \sin^2 \Theta \sin^2 \pi sm/P (\cos^2 \Phi - \cos^2 \pi sm/P) + \\ + (Rds/P) \sin \Phi \sin 2\theta \sin 2\pi sm/P + \cos^2 \Theta d^2 s^2 / P^2]}{4R^2 [\sin^2 \pi sm/P + \\ + d^2 s^2 / 4P^2 R^2]^{3/2}} \left. \right\}, \quad (6)$$

где  $\Theta$ ,  $\Phi$  — углы, которые образует момент перехода мономера номера 0 соответственно с осями  $z$  и  $x$ .

Результат зависит от констант спирали  $R$ ,  $P$ ,  $d$ ,  $m$ , дипольного момента перехода хромофора  $P_{n\alpha}$  и его ориентации.

При выполнении вычислений было найдено, что для многих спиралей первый член в сумме дает вклад около 90%. Сумма (6) также часто упрощается. Например, для спиралей, подобных спиральям нуклеиновой кислоты ДНК,  $m = 1$  и  $\Theta = \pi/2$ . Тогда разрешены только переходы на  $\mu = \pm 1$  и для них

$$E_{(0,\pm 1)}^f - E_0^f = \frac{|P_{n\alpha}|^2}{4R^3} \sum_{s=1} \cos 2\pi s/P \left\{ \frac{\cos 2\pi s/P}{[\sin^2 \pi s/P + d^2 s^2 / 4P^2 R^2]^{3/2}} + \right. \\ \left. + \frac{3\sin^2 \pi s/P (\cos^2 \Phi - \cos^2 \pi s/P)}{[\sin^2 \pi s/P + d^2 s^2 / 4P^2 R^2]^{3/2}} \right\}.$$

### Множественное возбуждение без смешивания состояний

Пренебрегая обменом электронами, предполагая отсутствие постоянного дипольного момента и учитывая только небольшое число одновременных возбуждений, мы можем написать гамильтониан нашей системы в представлении вторичного квантования [2]

$$H = E_0 + \sum_s \Delta_f B_s^+ B_s + \frac{1}{2} \sum_{s \neq s_1} V_{ss_1} (of; fo) (B_s + B_s^+) (B_{s_1} + B_{s_1}^+), \quad (7)$$

где

$$\Delta_f = E_s^f - E_s^0.$$

Наши обозначения совпадают с обозначениями Аграновича.  $B_s^+$  и  $B_s$  — операторы уничтожения и рождения возбуждения  $s$ -го мономера.

Квадратичная форма (7) может быть диагонализирована по методу Тябликова [6] при преобразовании

$$B_s = \sum_p \{B_p U_{sp} + B_p^+ V_{sp}^*\},$$

$$B_s^+ = \sum_p \{B_p^+ U_{sp}^* + B_p V_{sp}\},$$

где  $U$  и  $V$  удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} (E - \Delta_f)U_s &= \sum'_{s_1} V_{ss_1}(of; fo)(U_{s_1} + V_{s_1}), \\ -(E + \Delta_f)V_s &= \sum'_{s_1} V_{ss_1}(of; fo)(U_{s_1} + V_{s_1}) \end{aligned} \quad (8)$$

нормировкой

$$\sum_s \{|U_s|^2 - |V_s|^2\} = 1.$$

Из (8) следует, что

$$V_s = -\frac{E - \Delta_f}{E + \Delta_f} U_s.$$

Поэтому вместо (8) надо решить систему уравнений

$$\frac{E^2 - \Delta_f^2}{2\Delta_f} U_s = \sum'_{s_1} V_{ss_1}(of; fo)U_{s_1} \quad (9)$$

при условии нормировки

$$\sum_s \frac{4E\Delta_f}{E + \Delta_f} |U_s|^2 = 1. \quad (10)$$

Подставляя

$$U_s = N^{-1/2} \exp[2\pi i (kn + ka/P + \alpha\mu m/P)] U \quad (11)$$

в уравнение (9), нетрудно убедиться, что оно удовлетворяет (9), если

$$\frac{E^2 - \Delta_f^2}{2\Delta_f} U = \Gamma(k, \mu) U, \quad (12)$$

где

$$\Gamma(k, \mu) = 2 \sum_n \sum_{\alpha} V_{n\alpha, l\beta}^{(of; fo)} \cos 2\pi \{k(n-l) + (k/P + \mu m/P)(\alpha - \beta)\}.$$

Подобная сумма возникала в приближении Гайтлер—Лондона (см. уравнение (3)).

Решением уравнения (12) является

$$E^2(k, \mu) = \Delta_f^2 + 2\Delta_f \Gamma(k, \mu),$$

и с помощью нормировки (10) находим

$$U(k, \mu) = \frac{E(k, \mu) + \Delta_f}{2 \sqrt{E(k, \mu) \Delta_f}}. \quad (13)$$

Как показал Агранович, момент перехода определяется формулой

$$\vec{P}(\mu) = \frac{2\Delta_f}{E(o, \mu) + \Delta_f} \sum_n \sum_{\alpha} \vec{P}_{n\alpha} U_{n\alpha}(o, \mu). \quad (14)$$

Подставляя (13) в (14), находим

$$\vec{P}(\mu) = N^{-1/2} \sqrt{\frac{\Delta_f}{E(0, \mu)}} \sum_n \sum_\alpha \exp[2\pi i \alpha \mu m / P] \vec{P}_{n\alpha}.$$

Значит правила отбора остаются теми же самыми, как в приближении Гайтлер — Лондона, но возникает «хромический» эффект, т. е. изменение интенсивностей переходов. Интересно сравнить результаты этого раздела, которые далее мы будем отмечать индексом 1, с результатами раздела «Приближение Гайтлер — Лондона», которые будут обозначаться индексом 0. Тогда

$$E_0(k, \mu) = \Delta_f + \Gamma(k, \mu),$$

$$E_1(k, \mu) = (\Delta_f^2 + 2\Delta_f \Gamma(k, \mu))^{1/2}.$$

При этом отношение интенсивностей, вычисленных в обоих приближениях, будет равно

$$\frac{I_1(\mu)}{I_0(\mu)} = \frac{\Delta_f}{E(0, \mu) + \Delta_f} = \frac{1}{\sqrt{1+2x}} = 1 - x + \frac{3}{2}x^2 + \dots,$$

где  $x = \Gamma(0, \mu)/\Delta_f$  — небольшой параметр.

Относительное изменение энергий возбуждения также можно выразить через этот параметр

$$\frac{E_1(0, \mu) - E_0(0, \mu)}{\Delta_f} = \sqrt{1+2x} - (1+x) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \dots$$

Таким образом, сдвиг энергии квадратичный, а хромический эффект линейный относительно параметра  $x$ .

### Учет смешивания молекулярных состояний

Теория, развитая Аграновичем [2], удобна для трактовки взаимодействия любого числа энергетических состояний. Для простоты предположим, что смешиваются только два уровня: первый возбужденный уровень  $f$  и второй возбужденный уровень  $g$ .

Вместо  $U$  в (25) мы теперь имеем  $U_f$  и  $U_g$ , связанные следующей парой\* уравнений для каждого  $\mu$  при  $k=0$

$$(E - E_f)U_f = \frac{2D_{fg}E_g}{E + E_g}U_g,$$

$$(E - E_g)U_g = \frac{2D_{fg}E_f}{E + E_f}U_f, \quad (15)$$

где

$$E_f = (\Delta_f^2 + 2\Gamma_{ff}\Delta_f)^{1/2},$$

$$E_g = (\Delta_g^2 + 2\Gamma_{gg}\Delta_g)^{1/2}.$$

\* Нетрудно убедиться, что взаимодействуют только такие подуровни  $f$  и  $g$  экситонной зоны, которые принадлежат к одному и тому же неприводимому представлению группы кристалла. Взаимодействие двух дважды вырожденных уровней сводится к вековому уравнению четвертого порядка. При нашем выборе  $B_\alpha(\mu)$  детерминант четвертого порядка распадается на два тождественных детерминанта второго порядка.

$$D_{fg} = 2 \sqrt{\frac{\Delta_f \Delta_g}{E_f E_g}} \sum_n \sum_a V_{na, l\beta}(of; go) \cos 2\pi a \mu m / P,$$

$$\Gamma_{ff} = 2 \sum_n \sum_a V_{na, l\beta}(of; fo) \cos 2\pi a \mu m / P,$$

$$\Gamma_{gg} = 2 \sum_n \sum_a V_{na, l\beta}(og; go) \cos 2\pi a \mu m / P.$$

Система уравнений (15) имеет решение, если

$$E_{\pm}^2 = \frac{1}{2} (E_f^2 + E_g^2) \pm \frac{1}{2} \{ (E_f^2 - E_g^2)^2 + 16 E_f E_g D_{fg}^2 \}^{1/2}.$$

Здесь нормировка имеет вид

$$\sum_{\eta_i=f, g} |U_{\eta_i}|^2 \frac{4EE_{\eta_i}}{(E + E_{\eta_i})^2} = 1.$$

Дипольный момент перехода

$$\vec{P}_{\eta}(\mu) = N^{-1/2} \sum_{\eta_i=f, g} \frac{2 \sqrt{\Delta_{\eta_i} E_{\eta_i} U_{\eta_i}^{\eta_i}}}{E_{\eta_i} + E_{\eta_i}} \sum_n \sum_a \exp(2\pi i a \mu m / P) \vec{P}_{n\eta_i}^{\eta_i}.$$

$$\eta_i = +, -.$$

Рассмотрим в качестве примера случай, где дипольный момент для  $f$  и  $g$  переходов лежит в плоскости  $\perp z$ , с углами  $\Phi_f$  для  $f$ ,  $\Phi_g$  для  $g$ . Разрешены переходы на вырожденный уровень  $\mu = \pm 1$ . Если мы обозначим через

$$a_{\eta_i}^- = N^{-1/2} \frac{2 \sqrt{\Delta_{\eta_i} E_{\eta_i} U_{\eta_i}^-}}{E_- + E_{\eta_i}},$$

тогда

$$P_x^- \pm iP_y^- = Na_f^- P_f e^{\pm i\Phi_f} + Na_g^- P_g e^{\pm i\Phi_g}$$

и

$$|\vec{P}^-|^2 = (P_x^-)^2 + (P_y^-)^2 = N^2 (a_f^-)^2 (P_f)^2 + N^2 (a_g^-)^2 (P_g)^2 + 2N^2 a_f^- a_g^- P_f P_g \cos(\Phi_f - \Phi_g),$$

т. е. хромический эффект зависит и от  $a_f$ ,  $a_g$  и от  $\Phi_f - \Phi_g$ . Численный расчет для параметров

$$\left. \begin{array}{l} \Delta_f = 4,77 \text{ ev.}, \quad \Gamma_{ff} = 0,15 = \Gamma_{gg} \\ \Delta_g = 6,20, \quad D_{fg} = 0,20, \end{array} \right\} \text{ для } \begin{array}{l} \Phi_f = \pi/4, \\ \Phi_g = 3\pi/4. \end{array}$$

дает

$$\begin{array}{l} E_f = 4,92, \quad E_- = 4,89, \quad U_g^- = -0,133, \quad U_f^- = 0,998, \\ E_g = 6,35, \quad E_+ = 6,37, \quad U_g^+ = 0,987, \quad U_f^+ = 0,133 \end{array}$$

и для  $P_f = P_g$ ; возникает хромический эффект  $\sim 2,5\%$ .

## Сложные спирали

В структуре Ватсона и Крика для ДНК [7] предлагается модель молекулы, как две сплетенные спирали. Может быть, и более сложные структуры найдутся в природе. Волновые функции таких молекул нельзя написать в явном виде. Приходится в нулевом приближении для каждого случая отдельно решать вековое уравнение порядка  $Q$ , где  $Q$  равно числу спиралей, входящих в структуру (для простоты предполагается, что межспиральное взаимодействие слабее внутри спирального; если это условие не выполняется, придется употреблять другой подход).

Из соображения симметрии можно сказать, что будут взаимодействовать только состояния, волновые функции которых относятся к одинаковым неприводимым представлениям группы кристалла.

Так, в общем случае каждый уровень отдельной спирали расщепляется на  $Q$  уровней. Если в отдельной спирали разрушены три перехода (два на  $E_1$ , один на  $A$ ), то в сложной спирали могут быть разрешены до трех  $Q$  переходов.

Для двух тождественных правых спиралей одинакового радиуса, повернутых на  $180^\circ$  друг от друга, в приближении Гайтлер — Лондона мы имеем

$$\psi_{\pm}^f(k, \mu) = N^{-1/2} \sum_n \sum_{\alpha} \exp[2\pi i(kn + k\alpha/P + \alpha\mu m/P)] (\chi_{n\alpha}^{f\zeta_1} \pm \chi_{n\alpha}^{f\zeta_2}),$$

$$E_{\pm}^f(k, \mu) - E_0^f = 2 \sum_n \sum_{\alpha} \cos 2\pi \{k(n-l) + (k/P + \mu m/P)(\alpha - \beta)\} \times$$

$$\times [V_{n\alpha\zeta_1, l\beta\zeta_1}(of; fo) \pm V_{n\alpha\zeta_1, l\beta\zeta_2}(of; fo)],$$

$$\vec{P}(\mu) = N^{-1/2} \sum_n \sum_{\alpha} \exp[2\pi i\alpha\mu m/P] \{\vec{P}_{n\alpha\zeta_1} \pm \vec{P}_{n\alpha\zeta_2}\};$$

$\zeta_1$  относится к первой спирали,  $\zeta_2$  относится ко второй спирали. Теперь, если  $\Phi_{\zeta_2} = \Phi_{\zeta_1} + \pi$ ,  $n\Theta_{\zeta_2} = \Theta_{\zeta_1}$ , то в сложной спирали будут разрешены только переходы на уровни  $A^+$ ,  $A^-$ ,  $E_1^-$ . В случае  $\Theta = \pi/2$  разрешены только переходы на  $E_1^-$ .

### Некоторые численные результаты и сравнение с работой Тиноко [4]

Как уже видно из предыдущего рассмотрения, структура энергетических уровней и хромический эффект зависят сильно от параметров спиралей. Тиноко рассматривает упрощенную модель ДНК как две тождественные спирали, повернутые на  $175^\circ$  с константами

$$m = 1, \quad \Delta_f = 4,77 \text{ ev (2600\AA)},$$

$$P = 10, \quad \Delta_g = 6,20 \text{ ev (2000\AA)},$$

$$R = 3\text{\AA}, \quad \Theta_f = \pi/2 = \Theta_g,$$

$$d = 33,6\text{\AA} \quad \Phi_g = \Phi_f + \pi/2 \text{ и } \Phi_f \text{ неизвестно,}$$

$$F_f = 0,27 = F_g, \text{ где } F \text{ — сила осциллятора.}$$



Расчеты двух сплетенных спиралей с учетом смешивания конфигурации сложные. Поэтому мы сравним с результатами, полученными в конце раздела «Учет смешивания молекулярных состояний» для одной спирали с параметрами, перечисленными выше. Подобные расчеты показывают, что для всех  $\Phi_j$  хромический эффект в одной спирали (учитывая смешивание конфигурации и многократное возбуждение) не превышает 5%. Тиноко рассчитывает хромический эффект для соответствующей модели ДНК с помощью теории возмущения и получает эффект порядка 10—30% (в зависимости от  $\Phi_j$ ).

Такое же несогласие найдено Аграновичем [2] при сравнении точного решения экситонной проблемы в кристаллах, с решениями, полученными методом теории возмущений. Это указывает, что и здесь теория возмущения неприменима для получения количественных результатов.

Из наших результатов можно сделать вывод, что хромический эффект в ДНК полностью не объясняется резонансным взаимодействием и смешиванием состояний.

Возможно, что в некоторых полимерах проявятся хромический эффект и смещения уровней, описанных в нашей работе. Нуклеиновые кислоты, к сожалению, являются слишком сложными полимерами, и приходится прибегать к значительным упрощениям.

Автор хочет выразить свою искреннюю благодарность А. С. Давыдову и В. М. Аграновичу за ценные дискуссии и Московскому государственному университету за гостеприимство.

#### [ЛИТЕРАТУРА

1. Агранович В. М. ЖЭТФ, 37, 430, 1959.
2. Агранович В. М. ФТТ, 3, 811, 1961.
3. Natta G. Makromolekulare. Chemie, 35, 94, 1960.
4. Tinoco I. Tr. Amer. Chem. Soc., 82, 4785, 1960.
5. Moffitt W. Jour. Chem. Phys., 25, 467, 1956.
6. Боголюбов Н. Н. Лекции по квантовой статистике. Киев, Радянська школа, 1949.
7. Watson T. D., Crick F. H. C. Proc. Roy. Soc., A 223, 80, 1954.

Поступила в редакцию  
5. 6 1961 г.

Кафедра  
электродинамики и квантовой теории