

Потребуем, чтобы амплитуда имела полюс при $f^2=0$. Это дает уравнение

$$1 + \frac{g}{8\pi^2} B(m, \mu) = 0, \quad (8)$$

и формула (6) превращается в

$$A = -\frac{i}{C(m, \mu)} \frac{[\bar{u}(p') \gamma_\mu u(p)] [\bar{u}(q') \gamma_\mu u(q)]}{f^2}.$$

Сравнивая ее с амплитудой меллеровского рассеяния

$$A_M = -\frac{i\alpha}{\pi} \frac{[\bar{u}(p') \gamma_\mu u(p)] [\bar{u}(q') \gamma_\mu u(q)]}{f^2},$$

получим второе уравнение для определения параметров m и μ :

$$\frac{\pi}{C(\mu, m)} = \alpha = \frac{1}{137}. \quad (9)$$

Уравнения (8) и (9) при условии $\mu > m$ имеют единственное решение, которое было найдено численными методами:

$$m \sqrt{g} \cong 4,7, \quad \frac{\mu}{m} \cong 1,11. \quad (10)$$

Любопытным образом значение безразмерной комбинации $m \sqrt{g}$ примерно совпадает с тем, которое получается в теории Гейзенберга (в разных работах оно колеблется примерно от 5 до 6).

Проверкой самосогласованности теории является расчет массы фермиона с полученным отношением $\mu/m \cong 1,11$ путем рассмотрения его собственно энергетической диаграммы. Но соответствующие вычисления весьма сложны и требуют применения счетной машины, поэтому они пока не проведены.

Авторы благодарны проф. Д. Д. Иваненко за постоянное внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наумов А. И. «Ядерная физика», 7, 664, 1968.
2. Гейзенберг В. Введение в единую полевую теорию элементарных частиц. М., «Мир», 1968.
3. Иваненко Д. Д., Бродский А. М. ДАН СССР, 84, 683, 1952.
4. Наумов А. И. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., № 2, 1967; № 2, 1968.

Поступила в редакцию
26.5 1969 г.

Кафедра
химической механики мехмата

УДК 577.3:539.19

А. К. КУКУШКИН

УЧЕТ ПОЛЯРНЫХ СОСТОЯНИЙ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ СПЕКТРЕ БЕЛКА

Впервые предположение о полупроводниковых свойствах белковых систем было высказано Иорданом [1] и Сент-Джорджи [2, 3]. К настоящему времени обнаружилось противоречие между значением запрещенного энергетического промежутка, полученным из опыта (2,7—3,5 эв) [7—11, 20—22] и вычисленными теоретическими значениями (5—6 эв) в работах Пульман [4] и других исследованиях (10 эв) [5, 6]. Обычно такое положение объясняли недостаточно чистой постановкой опыта: влиянием влаги, примесей и т. д. Однако последняя известная нам работа [9], выполненная на достаточно высоком экспериментальном уровне, дала такие же результаты. По-видимому, причина указанного противоречия состоит в том, что авторы теоретических работ не учитывали полярной ветви возбуждения в рассматриваемых системах, т. е. энерги-

ческих уровней, возникающих при образовании разделенных зарядов, взаимодействующих с поляризующейся средой. Полярные состояния играют существенную роль в образовании носителей тока в некоторых органических полупроводниках [12]. Впервые предположение о существовании таких состояний выдвинул Лайонс [13], а подробный количественный расчет положения спектра полярных состояний был выполнен В. А. Бендерским [12, 14]. В работе [15] подобный расчет был проделан для оценки положения спектра полярных состояний кристалла тирозина. Позднее предположение о необходимости учета энергии поляризации для белков высказывалось Розенбергом [16].

В данной работе дается оценка положения уровней полярных состояний пространственной сетки пептидных групп, соединенных водородными связями. Энергия уровней спектра полярных состояний, отсчитываемая от основного, нижнего уровня энергии системы, определяется следующим выражением [12]:

$$E = I - A - \left(1 - \frac{\gamma^2}{2\pi\epsilon}\right) e^2 \int \frac{|\Phi_{m_0}(\vec{r})|^2 |\Phi_{mq}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' - \\ - \frac{\gamma^2}{4\pi\epsilon} e^2 \left\{ \int \frac{|\Phi_{m_0}(\vec{r})|^2 |\Phi_{m_0}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' + \right. \\ \left. + \int \frac{|\Phi_{mq}(\vec{r})|^2 |\Phi_{mq}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' \right\}. \quad (1)$$

Обозначения применительно к нашему случаю имеют следующий смысл: $I - A$ — разность потенциала ионизации и средства к электрону пептидной группы:

$$- \left(1 - \frac{\gamma^2}{2\pi\epsilon}\right) e^2 \int \frac{|\Phi_{m_0}(\vec{r})|^2 |\Phi_{mq}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' = -E_{\text{дисс}}$$

энергия кулоновского взаимодействия двух ионов пептидных групп, между которыми произошел перенос электрона, с учетом поляризации среды:

$$- \frac{\gamma^2}{4\pi\epsilon} e^2 \left\{ \int \frac{|\Phi_{m_0}(\vec{r})|^2 |\Phi_{m_0}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' + \right. \\ \left. + \int \frac{|\Phi_{mq}(\vec{r})|^2 |\Phi_{mq}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' \right\} = -E_{\text{пол}}$$

энергия поляризации системы двумя пептидными группами, между которыми произошел перенос заряда; $\Phi_{m_0}(\vec{r})$ — волновая функция электрона, локализованного на центре кристалла; $\Phi_{mq}(\vec{r})$ — волновая функция дырки (положительного заряда), локали-

зованного на центре кристалла; $\frac{\gamma^2}{2\pi\epsilon} = \sum_i 2\pi^3 \frac{M_i^2}{\epsilon_i V_0}$ — множитель, учитывающий

решеточную сумму по всем пептидным группам системы [12], суммирование по возбужденным состояниям пептидной группы; ϵ_i — энергия возбуждения пептидной группы на i -уровень; M_i — дипольный момент перехода на i -уровень; V_0 — объем кристалла, приходящийся на одну пептидную группу.

В качестве исходных данных для расчета были взяты молекулярные орбиты φ_i ($i=1, 2, 3$), энергии возбуждения и силы осциллятора пептидной группы из работы [6]. Взяв значение V_0 равным 77 \AA^3 [17], получим

$$\frac{\gamma^2}{4\pi\epsilon} = \frac{3\pi^3 \hbar^2 e^2}{2m_0} \frac{1}{V_0} \sum \frac{f_i}{\epsilon_i^2} = 0,39. \quad (2)$$

Для нашего случая

$$\Phi_{m_0}(\vec{r}) = \Phi_2(\vec{r}); \quad \Phi_{mq}(\vec{r}) = \Phi_3(\vec{r}), \quad (3)$$

где $\Phi_2(\vec{r})$, $\Phi_3(\vec{r})$ — волновые функции, найденные Йомоза [6]. Тогда из уравнений (1) и (3) имеем

$$e^2 \int \frac{|\Phi_{m0}(\vec{r})|^2 |\Phi_{m0}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r d^3 r' \equiv \\ \equiv e^2 \int \frac{|\Phi_2(\vec{r})|^2 |\Phi_3(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r d^3 r' = J_{22},$$

а подставляя числовые значения, получим

$$J_{22} = 9,6 \text{ эв}, \quad J_{33} = 8,9 \text{ эв}, \quad E_{\text{пол}} = 7,3 \text{ эв}.$$

Аналогично

$$e^2 \int \frac{|\Phi_{m0}(\vec{r})|^2 |\Phi_{mq}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r d^3 r' \equiv \\ \equiv e^2 \int \frac{|\Phi_2(\vec{r})|^2 |\Phi_3(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r d^3 r' = J'_{23}.$$

Для расчета J'_{23} необходимо знать величины γ_{ij} , двухцентровые кулоновские интегралы по атомным функциям, принадлежащим соседним пептидным группам. Принимая длину связи N—H...O равной 2,8 Å [17] и пользуясь полумпирическим методом Матага [18], получим

$$\tilde{\gamma}_{ij} = \begin{vmatrix} 2,44 & 1,95 & 1,78 \\ 2,96 & 2,31 & 2,04 \\ 3,89 & 2,82 & 2,48 \end{vmatrix} \text{ и } J'_{23} = 2,5 \text{ эв}.$$

Приведем обозначения атомов для расчета кулоновских интегралов по атомным функциям для соседних пептидных групп (0—1, с—2, N—3).

Тогда из уравнений (1) и (2) следует, что

$$E_{\text{дисс}} = \left(1 - \frac{\gamma^2}{2\pi\epsilon}\right) J'_{23} = 0,5 \text{ эв}.$$

Подставляя значение потенциала ионизации пептидной группы $I = 11,25 \text{ эв}$ и сродства к электрону $A = 0,93 \text{ эв}$ [6, 19] и $E_{\text{пол}}$, $E_{\text{дисс}}$ в уравнение (1), получим $E_1 = I - A - E_{\text{пол}} - E_{\text{дисс}} = 2,6 \text{ эв}$, $E_{\infty} = I - A - E_{\text{пол}} = 3,1 \text{ эв}$ (обозначения ясны на рисунке). Необходимо отметить, что E_{∞} соответствует энергии системы с двумя разделенными на бесконечности зарядами с учетом поляризации окружающей среды; E_{∞} характеризует положение зоны проводимости [12]. На рисунке не показано небольшое около 0,02 эв расщепление уровней на экситонные зоны. Величина запрещенного промежутка 3,1 эв согласуется с экспериментальными данными: Эли с сотрудниками получил 2,6—3,1 эв [7, 8], Снарт — 2,8 эв [9]. Для кристаллов глицина и полиглицина получены величины соответственно 2,92 и 3,19 эв [7]. Приведенный расчет из-за обилия допущений носит приближенный характер, однако и он в принципе может объяснить полученные на эксперименте значения энергетического промежутка между валентной зоной и зоной проводимости.

Подобный подход можно применить и к другим упорядоченным биологическим системам (агрегатам хлорофилла, ДНК, комплексам белков в митохондриях), в которых миграция энергии имеет существенное значение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Jordan P. Naturwissenschaften, 26, 693, 1938.
2. Szent-Gyorgi A. Nature, 148, 157, 1941.
3. Szent-Gyorgi A. Science, 93, 609, 1941.

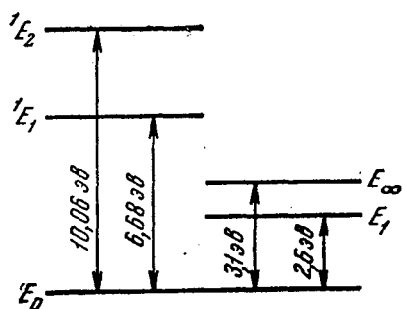


Схема энергетических уровней рассматриваемой системы E_0 — основной энергетический уровень, 1E_1 — первый возбужденный синглетный уровень, 1E_2 — второй возбужденный синглетный уровень, E_1 — нижний уровень спектра полярных состояний, E_{∞} — верхний, предельный уровень спектра полярных состояний, дно зоны проводимости

4. Suard M., Berthier G., Pullman B. BVA, 52, 254, 1964.
5. Yomoza S. J. Phys. Soc. Japan., 19, 1718, 1964.
6. Yomoza S. Biopolymers, 2, 1, 1964.
7. Cardew M. H., Eley D. D. Diss. Farad. Soc., 27, 115, 1959.
8. Eley D. D., Sprivey D. D. Nature, 188, 725, 1960.
9. Smart R. Biopolymers, 6, 73, 1968.
10. Nelson R. C. J. Chem. Phys., 39, 112, 1963.
11. Владимиров Ю. А. Фотохимия и люминесценция белков. М., «Наука», 1965.
12. Бендерский В. А. «Журнал структурной химии», 4, 415, 1963.
13. Lyons L. E. J. Chem. Soc., 5001, 1957.
14. Бендерский В. А., Блюменфельд А. А. «Журнал структурной химии», 7, 370, 1966.
15. Кукушкин А. К. Молекулярная биофизика. Тез. докладов на Всесоюзной конференции молодых ученых. Изд-во АН СССР, Пуцдино на Оке, 1966.
16. Цит. по Nature (Engl.), 218, 118, 1968.
17. Гурская Г. Структура аминокислот. М., «Наука», 1966.
18. Mataga N., Nishimoto K. Z. Physik. Chem. (Frankfurt), 13, 140, 1957.
19. Pople J. A. Frans. Farad. Soc., 49, 1375, 1953.

Поступила в редакцию
25.5 1969 г.

Кафедра
биофизики

УДК 530.12:531.54

В. А. БАРЫНИН

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНО ТРЕХМЕРНАЯ МОДИФИКАЦИЯ ТРЕХМЕРНОГО ХРОНОМЕТРИЧЕСКИ-ИНВАРИАНТНОГО ДВУХМЕТРИЧЕСКОГО ФОРМАЛИЗМА

Предложенный в предыдущей работе¹ трехмерный хронометрически инвариантный х. и. двухметрический формализм не является последовательно трехмерным, так как ковариантное дифференцирование осуществляется в нем на основе четырехмерной (хотя и не являющейся четырехмерным тензором) метрики системы отсчета.

Можно развить последовательно трехмерную модификацию этого формализма, в которой будут определены операции х. и. дифференцирования по времени и х. и. ϵ -ковариантного дифференцирования по пространственным координатам.

Определим х. и. ϵ -ковариантную трехмерную производную произвольного трехмерного х. и. вектора a^i следующим образом:

$$\nabla_k a^i = \frac{\partial^* a^i}{\partial x^k} + e_{ki}^i a^l, \quad (1)$$

где

$$e_{ki}^i = \frac{1}{2} \epsilon^{im} \left(\frac{\partial^* \epsilon_{km}}{\partial x^l} + \frac{\partial^* \epsilon_{ml}}{\partial x^k} - \frac{\partial^* \epsilon_{kl}}{\partial x^m} \right). \quad (2)$$

Величины (2) ведут себя как обычные символы Кристоффеля при чисто пространственных преобразованиях координат и инварианты относительно произвольных преобразований времени, чем и оправдывается данное определение.

Построим величины:

$$\tilde{P}_{\mu\nu}^\lambda = \frac{1}{2} g^{\lambda\epsilon} (\nabla_\nu g_{\epsilon\mu}^* + \nabla_\mu g_{\epsilon\nu}^* - \nabla_\epsilon g_{\mu\nu}^*),$$

где ∇_k — определенная выше трехмерная х. и. ϵ -ковариантная производная, ∇_0 — х. и. производная по времени, т. е. $\frac{\partial^*}{\partial t}$, а g^* — х. и. аналог четырехмерного метрического тензора $g_{\alpha\beta}$ (Латинские индексы пробегают значения 1, 2, 3, а греческие — 0, 1, 2, 3.) Несложным вычислением получаем

$$\tilde{P}_{\mu\nu}^\lambda = \tilde{\Gamma}_{\mu\nu}^\lambda - \delta_\epsilon^\lambda \delta_\mu^\sigma \delta_\nu^\tau e_{\sigma\tau}^i,$$

¹ В. А. Барынин. «Вести. Моск. ун-та», физ., астроном., № 6, 92, 1969.