

На рисунке, *a* приведены формы согласующих стержней. Спектральные характеристики цилиндрической согласующей системы и вновь полученных приведены на рисунке, *б*. Из графиков видно, что стержень, согласующий волноводы на частоте, соответствующей значению  $k=2,1$ , имеет несколько более широкую спектральную характеристику, чем четвертьволновый цилиндрический стержень. А второй полученный стержень ( $k=1,9$ ), обладая меньшей относительной длиной (отношение  $l_0$  к длине волны согласования), имеет несколько более узкую спектральную характеристику.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Именитова Е. В., Чернышев К. В. Вестн. Моск. ун-та. Сер. Физ., Астрон., 1981, 22, № 4, с. 37. [2] Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1976.

Поступила в редакцию  
30.12.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 6

УДК 541.144.7

#### ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МИГРАЦИИ ЭНЕРГИИ ПРИ ФОТОСИНТЕЗЕ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ СВЕТСОБИРАЮЩЕЙ МАТРИЦЫ

Е. М. Мелихова, А. К. Кукушкин

(кафедра биофизики)

Аппарат фотосинтеза высших растений и других фотосинтезирующих организмов содержит агрегаты пигментных молекул, поглощающих свет и доставляющих запасенную энергию к фотохимическим реакционным центрам. В литературе обсуждаются два типа механизмов, которые могут объяснить высокую скорость переноса энергии и его направленность к реакционным центрам. Экситонный механизм описывает перенос энергии в системе идентичных молекул (типа молекулярных кристаллов), скорость его сопоставима со скоростью колебательной релаксации ( $10^{13} \text{ с}^{-1}$ ). Миграция носит характер ненаправленных блужданий. По механизму Фёрстера — Галанина происходит более медленный перенос энергии. Его скорость сопоставима со скоростями излучательной и безызлучательной дезактивации и определяется интегралом перекрытия спектра излучения донора и спектра поглощения акцептора, расстоянием между молекулами и их взаимной ориентацией. Когда донор и акцептор отличаются по спектральным свойствам, перенос принимает направленный характер (в сторону молекулы с более низким возбужденным уровнем). Расчет миграции энергии для различных моделей организации светособирающей матрицы и сравнение с экспериментальными данными по флуоресценции может помочь в выяснении того, какой механизм переноса энергии реализуется в действительности при фотосинтезе.

В 1969 г. Монролл рассмотрел задачу переноса энергии по светособирающей пигментной матрице в рамках теории случайных блужданий возбуждения по решетке [1]. При этом рассматривалась решетка из  $M$  точек с ловушкой в начале координат и с периодическими граничными условиями. Введение периодических граничных условий озна-

чает, что существует целое  $N$ , такое, что точки решетки  $s = (s_1, s_2, \dots, s_k)$  удовлетворяют условию

$$(s_1 + N, s_2 + N, \dots, s_k + N) = (s_1, s_2, \dots, s_k).$$

Для случая двумерной квадратной сетки, когда возбуждение переносится с равной вероятностью на ближайшие соседние точки, Монтролл нашел аналитическое выражение для среднего числа «скачков» возбуждения по сетке до захвата ловушкой [1], которое при больших  $M$  имеет вид

$$\langle n \rangle = \pi^{-1} M \ln M + 0,195056M. \quad (1)$$

В более поздних работах Сандерса, Руижгрока и Тен Боша проведены расчеты, явным образом учитывающие граничные условия. В качестве модели [2] была выбрана квадратная сетка с ловушкой в геометрическом центре. Авторы показали также, что при введении периодических граничных условий и при  $M \rightarrow \infty$  результаты их расчетов хорошо согласуются с данными Монтролла.

Известно, что тилакоиды хлоропластов имеют форму сплюснутых сферондов [3, 4]. На примере пигмент-белковых комплексов зеленой фотосинтезирующей бактерии

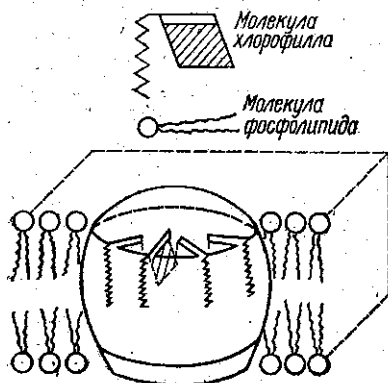


Рис. 1. Схематическое сечение мембраны хлоропласта, показывающее предполагаемую структуру пигмент-белкового комплекса [4]

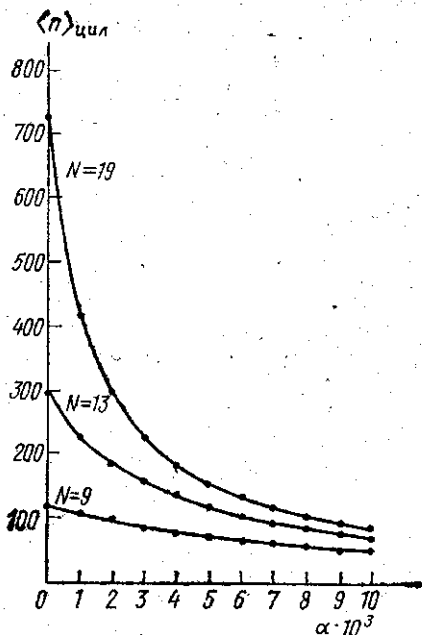


Рис. 2. Зависимость среднего пробега возбуждения по цилиндрической сетке  $\langle n \rangle_{\text{цил}}$  от вероятности распада возбуждения  $\alpha$

*Chlorobium limicola* показано, что все семь «бактерио-хлорофилл-кольцевых систем» [3] заключены в полый цилиндр, образованный нитями полипептидов. В модели пигмент-белкового комплекса, предложенной Андерсоном [4], тоже рассматривается некая сферическая белковая структура, в которую заключены молекулы хлорофилла (рис. 1). Отсюда видно, что особый интерес представляют сетки, «натянутые» на цилиндр и сферу. Настоящая работа посвящена расчету случайных блужданий возбуждения по таким сеткам.

1. **Описание модели и метода расчетов.** В основу всех вычислений положена модель, предложенная Сандерсом, Руижгроком и Тен Бошем [2]. Квадратная сетка имеет  $M$  точек, из них  $M-1$  — это моле-

кулы пигмента, а одна — ловушка, она расположена в геометрическом центре решетки. Захват возбуждения ловушкой происходит со стопроцентной эффективностью. В такой решетке есть точки трех типов:

- точки в углах решетки, имеющие два ближайших соседа,
- боковые точки, имеющие три соседа,
- внутренние точки, окруженные четырьмя соседями.

Предполагается также, что возбуждение, попав в некоторую точку с координатами  $(x, y)$ , может «перескочить» только на одну из ближайших соседних точек  $(x', y')$ . При этом возможны два случая:

1) время жизни возбуждения в точке  $(x, y)$  зависит от числа соседей этой точки  $C(x, y)$ ;

2) время жизни на узле  $(x, y)$  фиксировано. В дальнейшем мы будем рассматривать именно этот случай.

Для описанной выше модели авторы [2] предложили систему уравнений для расчета числа скачков  $D(x, y)$  возбуждения, стартующего из точки  $(x, y)$  до захвата ловушкой:

$$\begin{cases} D(x, y) = 1 + \frac{1}{C(x, y)} \sum_{x', y'}^{(x, y)} D(x', y'), & (x, y) \neq (a, a), \\ D(a, a) = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Ловушка имеет координаты  $(a, a)$ .

Рассмотрим теперь цилиндр конечной высоты и натянутую на него равномерную сетку. Ее можно получить, соединив противоположные концы квадратной сетки по одной из координат, например по  $y$ . Это означает введение периодических граничных условий в систему уравнений (2):

$$D(x, y + N) = D(x, y). \quad (3)$$

Здесь  $N$  — число узлов решетки по каждой из координат, так что полное число точек решетки  $M = N \times N$ . Для симметричной решетки  $N$  нечетно, координаты ловушки  $((N+1)/2; (N+1)/2)$ .

Система (2) решалась нами на ЭВМ БЭСМ-6 с помощью итерационного метода решения систем линейных уравнений, полученного объединением метода Либмана и метода релаксации по строкам [5]. Итерационный процесс продолжается до тех пор, пока не будет выполнено неравенство

$$\delta^{(k)} = \max |D^{(k)}(x, y) - D^{(k-1)}(x, y)| < \varepsilon,$$

где  $D^{(k)}(x, y)$  —  $k$ -е приближение к решению системы (2), а  $\varepsilon$  — положительное число. Мы полагали  $\varepsilon = 0,001$ .

2. Результаты и обсуждение. Нами проведено численное решение системы (2) с учетом периодических граничных условий (3) для цилиндрических сеток различного размера. Для примера в табл. 1 представлены результаты расчетов числа скачков возбуждения  $D_{\text{цил}}(x, y)$  по цилиндрической сетке от точки  $(x, y)$  до ловушки при  $N = 19$ . Для сравнения в табл. 2 даны результаты Сандерса и др. [2] для квадратной сетки того же размера —  $D_{\text{кв}}(x, y)$ . В табл. 3 приведены значения среднего числа скачков возбуждения по решетке  $\langle n \rangle$  в зависимости от размера решетки,

$$\langle n \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{x, y} D(x, y). \quad (4)$$

Таблица 1

 $D_{цвл}(x, y). N = 19$ 

19	765	766	769	774	780	786	792	797	799	801
18	759	760	764	769	776	783	789	794	797	799
17	746	747	752	759	768	776	783	789	793	795
16	725	728	735	744	755	766	775	783	788	790
15	696	700	710	724	739	753	765	775	781	783
14	655	661	678	698	719	738	754	766	774	777
13	596	609	637	669	698	723	742	757	766	771
12	507	539	589	637	677	709	733	750	761	765
11	350	445	538	609	660	698	726	745	757	762
10	0	350	507	595	654	694	723	743	755	761
	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19

Таблица 2

 $D_{кв}(x, y). N = 19$ 

19	740	741	745	749	755	761	767	771	774	775
18	735	736	740	745	752	759	765	769	773	
17	723	725	730	736	745	753	760	766		
16	704	706	713	722	733	743	753			
15	676	680	690	703	718	732				
14	636	643	659	679	699					
13	580	592	619	650						
12	493	524	573							
11	341	343								
10	0									
	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19

В работе [2] значения  $\langle n \rangle_{кв}$  для квадратной сетки при фиксированном времени жизни на узле не приведены. Они были определены нами на основании представленных в работе [2] значений  $D(x, y)$  по формуле (4). Значения  $\langle n \rangle_{тор}$  для тора находились нами по формуле Монтролла (1), а  $\langle n \rangle_{цвл}$  — из системы (2) настоящей работы.

Далее, как и в работе [2], была введена вероятность  $\alpha$  распада возбуждения на узле. Если время жизни возбуждения на узле  $\tau$ , а время спонтанного распада  $\tau_0$ , то  $\alpha = 1 - \exp(-\tau/\tau_0)$ . При условии  $\tau \ll \tau_0$  получаем  $\alpha \approx \tau/\tau_0$ . Оценки для  $\tau$  были взяты из работ [6] и [7]. Расчеты проводились для значений  $\alpha \in [0,001; 0,01]$ . С учетом вероятности распада возбуждения система уравнений (2) примет вид:

Таблица 3

$N$	$\langle n \rangle_{кв}$ [2]	$\langle n \rangle_{тор}$ [1]	$\langle n \rangle_{цвл}$
3	5	8	6
5	24	30	27
7	59	70	65
9	113	129	121
11	187	208	198
13	283	309	296
15	400	432	416
17	541	578	558
19	705	747	726

$$\begin{cases} D_{\alpha}(x, y) = (1 - \alpha) \left( 1 + \frac{1}{C(x, y)} \sum_{x', y'}^{(x, y)} D_{\alpha}(x', y') \right), & (x, y) \neq (a, a), \\ D_{\alpha}(a, a) = 0. \end{cases}$$

Зависимость среднего числа скачков возбуждения по цилиндрической сетке  $\langle n \rangle_{\text{цпл}}$  от вероятности распада возбуждения  $\alpha$  представлена на рис. 2.

Таблица 4

$$D_{\text{сф}}(x, y). N = 13, M = 364$$

$y$							
28	899	899	899	899	898	898	897
27	897	897	897	897	896	896	895
26	891	891	891	891	891	890	890
25	881	881	881	881	881	881	880
24	867	867	867	868	868	868	868
23	848	848	849	850	851	852	852
22	825	826	827	829	831	832	832
21	797	798	800	804	807	809	810
20	763	765	769	775	780	784	786
19	722	725	732	742	750	757	760
18	671	676	690	705	719	729	734
17	604	616	641	667	688	703	710
16	510	540	586	628	660	680	690
15	350	444	532	596	639	665	676
14	0	348	500	582	631	659	671
	7	8	9	10	11	12	13

Аналогичные расчеты проводились нами для цилиндров различной формы, т. е. с разным числом точек по высоте и периметру основания. Так, например, цилиндр, у которого по высоте  $N$  точек, а по периметру основания  $2N+2$  точки, можно считать подобным сфере с «выколотыми» полюсами, если принять, что вероятность перескока к ближайшим соседям на сфере не зависит от расстояния. Такая аналогия имеет

Таблица 5

$M$	$\langle n \rangle_{\text{сф}}$	$\langle n \rangle_{\text{тор}}$
24	29	29
60	91	90
112	193	190
180	339	333
264	531	520
364	772	754

Таблица 6

$M$	$\langle n \rangle_{\text{цпл}} - \langle n \rangle_{\text{кв}}$	$\langle n \rangle_{\text{тор}} - \langle n \rangle_{\text{цпл}}$	$\langle n \rangle_{\text{сф}} - \langle n \rangle_{\text{кв}}$
	$\langle n \rangle_{\text{кв}}$	$\langle n \rangle_{\text{цпл}}$	$\langle n \rangle_{\text{кв}}$
9	20	33	21
25(24)	13	11	
49	10	8	
81	7	7	
121	6	5	
225	4	4	
361(364)	3	3	9

смысл в том случае, когда рассматриваются параллели, близкие к экватору. Результаты вычисления числа скачков возбуждения от точки  $(x, y)$  до ловушки по такой «сферической» сетке  $D_{\text{сф}}(x, y)$  представлены в табл. 4 на примере сетки с 364 узлами. Зависимость среднего пробега возбуждения  $\langle n \rangle_{\text{сф}}$  от размера решетки показана в табл. 5. Для сравнения в этой же таблице приведены значения среднего пробега для тора с тем же количеством узлов  $\langle n \rangle_{\text{тор}}$ , рассчитанные нами по формуле Монтролла. В табл. 6 показано относительное изменение среднего пробега возбуждения в зависимости от формы сетки, выраженного в процентах. Видно, что геометрия модели светособирающей матрицы наиболее сильно влияет на средний пробег возбуждения при не очень больших размерах сетки ( $M < 100$ ).

Средний пробег возбуждения по «сферической» сетке изменяется при учете вероятности распада  $\alpha$  подобно тому, как это показано на

рис. 2. В результатах, полученных для цилиндрических сеток разного размера, обращает на себя внимание увеличение числа скачков возбуждения от точек, находящихся на середине самых удаленных от ловушки «меридианов» (см. табл. 4). По-видимому, этот эффект связан с прямоугольной формой сетки. Для цилиндрической сетки размер  $N^2$  он не наблюдается (см. табл. 1). Действительно, расчеты пока-

Таблица 7

$D_{\text{цил}}(x, y), M=7 \times 7$

$y$				
7	69	71	73	74
6	62	66	70	72
5	45	56	65	69
4	0	44	62	68
	4	5	6	7
	$x$			

Таблица 8

$D_{\text{цил}}(x, y), M=7 \times 16$

$y$				
16	233	233	233	232
15	231	231	231	230
14	226	226	226	225
13	216	216	216	216
12	201	202	204	204
11	181	184	188	190
10	153	160	170	175
9	104	131	152	162
8	0	102	141	156
	4	5	6	7
	$x$			

зывают, что с увеличением числа точек по периметру основания при неизменной высоте цилиндра этот эффект проявляется более отчетливо. В качестве примера приведены результаты для цилиндра, у которого по высоте 7 точек, а периметр основания меняется (табл. 7, 8).

Можно предложить следующее объяснение. Развернем мысленно нашу сетку на плоскость и сравним точки  $A$  и  $C$ , находящиеся соответственно на краю и в середине самого удаленного от ловушки «меридиана». У точки  $A$  три ближайших соседа, поэтому возбуждение, стартующее из точки  $A$ , движется к ловушке первое время более направленно, т. е. несколько быстрее, чем из точки  $C$ , имеющей 4 соседа. Однако путь из точки  $A$  к ловушке в среднем длиннее, чем из точки  $C$ :  $OA = \sqrt{(L/2)^2 + ((N-1)/2)^2}$ ,  $OC = L/2$ . Здесь  $N$  — число точек по

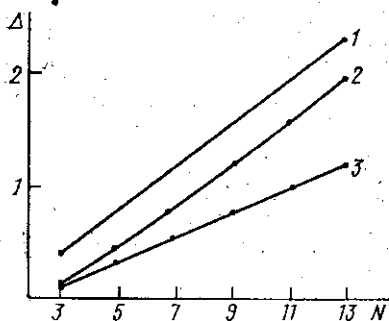


Рис. 3. Зависимость  $\Delta$  от размера решетки  $N$ :  $\Delta = OA - OC$ ;  $L = N - 1$  (1),  $N + 3$  (2) и  $2N + 2$  (3)

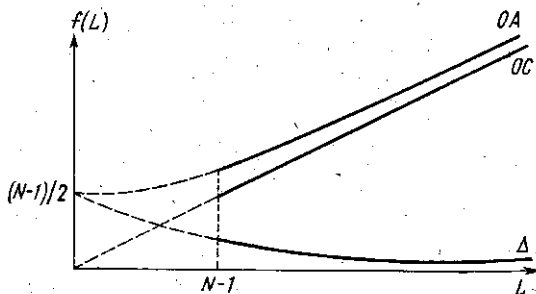


Рис. 4. Зависимость  $\Delta$  от протяженности решетки  $L$  при неизменной высоте  $N$ :  $OC = L/2$  (1),  $OA = \sqrt{(L/2)^2 + [(N-1)/2]^2}$  (2) и  $\Delta$  (3)

высоте цилиндра ( $N$  — нечетное), а  $L$  — число точек по периметру основания ( $L$  — четное). Обозначим разницу путей  $OA$  и  $OC$  через  $\Delta$ ,  $\Delta = OA - OC$ . Если пути  $OA$  и  $OC$  отличаются мало ( $\Delta \ll 1$ ), становится заметной разница в окружении точек  $A$  и  $C$ , поэтому число скачков возбуждения от точки  $A$  до ловушки будет меньше, чем от точки  $C$ , т. е.  $D(A) < D(C)$ . Когда же  $\Delta \geq 1$ , то красивыми эффектами можно пре-

небрежь, и тогда  $D(A) > D(C)$ . Зависимость  $\Delta$  от размеров решетки показана на рис. 3, 4. Из рис. 3 видно, что при увеличении размеров решетки ( $N$ )  $\Delta$  возрастает, максимальное значение  $D(x, y)$  при этом должно постепенно смещаться к граничным точкам «меридиана». Из рис. 4 следует, что чем больше протяженность решетки ( $L$ ) при заданной ее высоте  $N$ , тем отчетливее проявляется влияние граничных условий и максимальное значение  $D(x, y)$  перемещается к средним точкам «меридиана». Эти выводы подтверждаются расчетами на ЭВМ для решеток соответствующих размеров (табл. 7, 8 и 9, 10).

Таблица 9

$D_{\text{цил}}(x, y)$ .  $M = 5 \times 8$

$y$				
8	60	61	61	
7	58	59	59	
6	51	53	55	
5	36	44	49	
4	0	34	45	
	3	4	5	$x$

Таблица 10

$D_{\text{цил}}(x, y)$ .  $M = 9 \times 12$

$y$					
12	194	195	196	197	197
11	192	192	194	195	195
10	184	185	188	190	191
9	170	173	178	183	185
8	146	154	166	174	178
7	101	128	152	166	173
6	0	101	142	162	170
	5	6	7	8	9
					$x$

3. Заключение. Из полученных результатов можно сделать следующие выводы. Влияние формы сетки на средний пробег возбуждения ловушки наиболее отчетливо проявляется при не очень больших размерах сетки. Принимая во внимание недавние исследования, в которых показано, что в пигмент-белковых комплексах фотосистем I и II число светосборщиков не превышает 50 [8, 9], можно сказать, что геометрия модели пигмент-белкового комплекса будет влиять на время блуждания возбуждения до захвата ловушкой.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Montroll E. W. J. Math. Phys., 1969, 10, p. 735. [2] Sanders J. W., Ruijgrok T. W., Ten Bosch J. J. J. Math. Phys., 1971, 12, p. 534. [3] Уайт А., Хендлер Ф., Смит Э., Хилл Р., Леман И. Основы биохимии. Т. 2. М.: Мир, 1981. [4] Anderson J. M. ВВА, 1975, 416, p. 191. [5] Мак-Кракен Д., Дорн У. Численные методы и программирование на ФОРТРАНе. М.: Мир, 1977. [6] Борисов А. Ю., Годик В. И. В кн.: Биофизика фотосинтеза. М.: Изд-во МГУ, 1975, с. 170. [7] Фетисова З. Г. Канд. дис. М., МГУ, 1975. [8] Ames J. Progr. Bot., 1979, 41, p. 55. [9] Thornber J. Ph. Ann. Rev. Plant Physiol., 1975, 26, p. 127.

Поступила в редакцию 03.01.83.

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА: СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 6

УДК 538.245

#### ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛЕНОК С ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРОЙ С ПОМОЩЬЮ ТОРСИОННОГО МАГНИТОМЕТРА

Л. М. Коренкова, Т. Н. Легова, И. М. Сараева

(кафедра общей физики для физического факультета)

Торсионный метод является простым и надежным методом измерения магнитостатических параметров различных материалов. В частности, с помощью торсионного магнитометра можно измерить основные параметры пленок с ЦМД-структурой: константу наведенной маг-