

Автоволновая модель образования везикул на поверхности океана

В. А. Твердислов^{1,a}, Л. В. Яковенко^{1,b}, М. Е. Мазуров², И. М. Калюжный²

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра биофизики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

²Московский государственный университет экономики, статистики и информатики. Россия, 119501, Москва, Нежинская ул., д. 7.

E-mail: ^atverdislov@mail.ru, ^bleo.yakovenko@mail.ru

Статья поступила 01.07.2014, подписана в печать 22.08.2014.

Согласно гипотезе о возникновении жизни на Земле, предложенной соавторами настоящей статьи [4–6], при падении аэрозольной частицы, сформировавшейся при разрушении воздушных пузырей на поверхности древнего океана и покрытой монослоем амфифила, обратно на морской поверхности образуется везикула, покрытая двойным слоем амфифила. Везикула рассматривается в качестве прототипа клетки, поскольку обладает термодинамической неравномерностью вследствие несимметрии ионного распределения, а также хиральной асимметрией молекулярных компонентов. В настоящей работе поверхностный слой океана рассматривается как активная среда, для описания которой использованы уравнения Фитцхью–Нагумо. Вычислительный эксперимент показал, что в таких условиях действительно возможно формирование второго слоя амфифила с образованием стабильной бислоевой (липидной) везикулы, погружающейся в воду.

Ключевые слова: происхождение жизни, возникновение предшественников клеток, липидный бислой везикулы, поверхностный микрослой океана, уравнения Фитцхью–Нагумо.

УДК: 53.01, 53.047, 573.554. PACS: 68.43.Nn, 82.70.Rg, 87.10.Ed, 87.16.A–, 87.16.D–.

Введение

В настоящее время известно несколько гипотез возникновения жизни на Земле. Все предложенные ранее модели предшественников клеток (пробионтов) исходно предполагались равновесными — это модели А. И. Опарина, Дж. Б. С. Холдейна, Дж. Д. Бернала, М. Г. Руттена и др., поэтому они не соответствовали действительности, поскольку живые системы принципиально неравновесны [1, 2]. В предложенной В. А. Твердисловым и Г. Г. Хунджуа гипотезе показана возможность возникновения дискретных структур — везикул, содержащих электролит, инвертированный по ионному составу по отношению к морской воде, и абиогенно образовавшиеся биологически важные хиральные соединения с несимметричным соотношением энантиомеров [3–6]. Природным реактором, в котором могли возникнуть описанные структуры, была неравновесная граница раздела океан–атмосфера, а именно поверхностный микрослой (ПМС) океана. При этом неравновесность образовавшихся структур естественно следовала из условий их формирования [7].

Испарение воды с поверхности океана и инфракрасное излучение в атмосферу приводят к охлаждению ПМС толщиной 100–300 мкм на 0.5–1.0 °С. Это приводит к пространственному разделению ионов и органических соединений, в том числе, видимо, и энантиомеров хиральных соединений [8, 9]. Таким образом, ПМС представляет собой активную среду, в которой возможны процессы самоорганизации [4].

1. Гипотезы о возникновении жизни

Ранние гипотезы о возникновении жизни делятся на два класса: в одних считается, что сначала возник метаболизм, а потом появились механизмы запоминания и передачи информации из поколения в поколение (типичный пример — гипотеза А. И. Опарина), а в дру-

гих, наоборот, считается, что сначала возник механизм репликации макромолекул, а потом появился метаболизм (типичный пример — гипотеза Дж. Б. С. Холдейна) [10]. Все гипотезы предполагали, что для начала биологической эволюции необходимо было существование дискретных форм жизни — протоклеток, но ни в одной из них не описаны механизмы их формирования. Мы считаем, что ключевым моментом в возникновении клетки было именно формирование дискретных структур, отделенных от окружающей среды бислоевой мембраной, сформированной амфифилами, в частности липидами. Внутри таких везикул могли функционировать гиперциклы М. Эйгена, находиться коацерваты А. И. Опарина или другие, способные к метаболизму и репликации системы [11, 12]. Но для этого система исходно должна была быть термодинамически удаленной от равновесия, чтобы запас свободной энергии сделал протоклетку первичным реактором, имеющим возможность сопрягать энергодонорные и энергоакцепторные процессы преобразования вещества и информации [13–15].

2. Поверхностный микрослой океана как активная среда и генератор предшественников клеток

При испарении воды с поверхности океана в ПМС появляется градиент температуры, направленный от поверхности к объемной фазе и достигающий 1000 К·м⁻¹. Кроме того, возникает поток раствора к поверхности, сопровождающийся переносом растворенных веществ, ионов, коллоидных частиц и т. п. из объемной фазы в ПМС. Таким образом, на неравновесной границе океан–атмосфера при испарении воды образуется ПМС, характеризующийся повышенной концентрацией растворенных веществ, инвертированным солевым составом и пониженной температурой, т. е. существенно отличающийся от объемной фазы [16–21].

При наличии в среде амфифилов на верхней границе ПМС образуется монослой, приводящий к снижению поверхностного натяжения. Локальное возмущение такого стационарного состояния вызовет потоки вещества и энергии, соответствующие переходу системы в новое состояние, поэтому ПМС представляет собой активную среду, в которой возможно распространение автоволн, формирование диссипативных структур [4].

Процесс формирования аэрозоля на поверхности океана хорошо известен [22–24]. При наличии амфифила в ПМС поверхность аэрозольных капель оказывается покрытой разреженным монослоем амфифила, который уплотняется по мере испарения воды из капли. Когда аэрозольная частица, размеры которой имеют порядок 1–10 мкм, падает обратно на поверхность воды, на ее поверхности может сформироваться второй слой молекул амфифила, например, фосфолипида, и везикула окажется покрытой уже бислойной мембраной. Поскольку молекулы второго слоя обращены наружу своими полярными участками, а удельная плотность выше плотности морской воды, такая везикула может погружаться в воду [3, 4, 7, 25, 26]. Однако механизм образования второго слоя амфифила до сих пор описан не был.

Таким образом, существует естественный процесс, который приводит к формированию относительно стабильных везикул, покрытых бислойной (липидной) мембраной, имеющих клеточные размеры и солевой состав, инвертированный по одновалентным катионам по отношению к морской воде. Это, а также некоторые другие соображения, позволяют считать такие везикулы реальными кандидатами на роль предшественников клеток [3–7, 25, 26].

3. Стадии образования бислойной липидной везикулы при падении капли аэрозоля на поверхность океана в вычислительном эксперименте

Процесс образования бислойной липидной везикулы при падении капли аэрозоля на поверхность океана можно промоделировать в вычислительном эксперименте.

При падении везикулы на поверхность чистой воды гидрофобность наружной поверхности везикулы препятствует погружению везикулы в глубину, и она будет плавать по поверхности. Однако ситуация резко изменяется, если поверхностный слой воды становится активной средой.

Везикула возбуждает в поверхностной активной среде микроавтоволну, которая будет распространяться внутрь активной среды. Вместе с этой автоволной везикула будет проваливаться в активную среду, т.е. в морскую воду.

Для математического исследования автоволновых процессов в активных средах в настоящее время принято рассматривать системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа [27–29]:

$$\frac{\partial E_i}{\partial t} = F_i(E_1, \dots, E_n) + D_i \Delta E_i \quad (i = 1, \dots, n), \quad (1)$$

где E_i — переменные, F_i — нелинейные функции, D_i — коэффициенты диффузии, $\Delta E_i = \frac{\partial^2 E_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_i}{\partial z^2}$. В ряде

случаев адекватное описание может быть достигнуто с помощью двух уравнений вида (1)

$$\frac{\partial E_1}{\partial t} = F_1(E_1, E_2) + D_1 \Delta E_1, \quad \frac{\partial E_2}{\partial t} = F_2(E_1, E_2) + D_2 \Delta E_2.$$

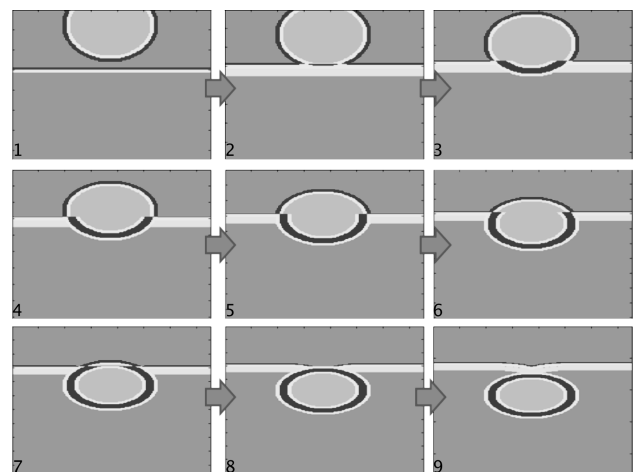
Для исследования нелинейных волн вихревого типа используется система из двух уравнений. В настоящей работе были использованы уравнения Фитцхью–Нагумо

$$\frac{\partial u}{\partial t} = C \varepsilon^{-1} \left(u - \frac{u^3}{3} - v \right) + \Delta u, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = \varepsilon (u + \beta - \gamma v) \quad (2)$$

с параметрами $\varepsilon = 0.03$, $p = 0.7$, $\gamma = 0.8$. Выбор полинома третьей степени в модели Фитцхью–Нагумо это один из вариантов построения N-образной зависимости от u в первом уравнении. Наличие N-образного участка характеризует активный характер среды, возможность протекания автоволновых процессов и самоорганизации. В модели Фитцхью–Нагумо переменная u характеризует кинетику движения капли в поверхностном активном слое океана и процесса «одевания» вторым монослоем амфифила при падении капли на поверхность океана и формировании везикулы. Вторая переменная v характеризует инактивацию процесса «одевания» везикулы вторым монослоем амфифила. Предполагается наличие на поверхности океана достаточного по толщине активного слоя, где происходит процесс эволюции капли.

Приближенное решение уравнений (2) в областях сложной формы и при наличии неоднородностей в области встречает значительные технические трудности. Эти трудности были преодолены с помощью разработанного метода сканирования, описанного в работах [27–29].

Визуализация результатов вычислительного эксперимента приведена на рисунке. Полученные результаты указывают на возможность образования везикул, покрытых бислойными мембранами и являющихся прототипами будущих клеток, размеры которых, согласно имеющимся оценкам, составляют 1–10 мкм, что имеет порядок размеров бактериальных клеток [4–7].



Результаты вычислительного эксперимента, описывающие падение капли аэрозоля, покрытой разреженным монослоем амфифила, на поверхность океана (1–2), «одевание» капли вторым монослоем на поверхности океана и формирование бислойной везикулы (3–7), погружение везикулы в воду (8–9)

Результаты численного моделирования описывают автоволновые процессы движения везикулы в поверхностном активном слое воды океана. Диссипативные структуры также могут образовываться, но исследование образования таких структур очень сложный процесс, выходящий за рамки настоящей работы.

Заклучение

Предложена автоволновая модель образования бислойной липидной везикулы при падении капли аэрозоля на поверхность океана. Результаты вычислительного эксперимента, описывающие падение на поверхность океана капли аэрозоля, покрытой разреженным монослоем амфифила и «одевание» капли вторым монослоем, соответствуют предложенной ранее феноменологической модели формирования предшественника клетки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 13-05-01174-а).

Список литературы

1. Bada J.L. // 2004. Earth and Planet. Sci. Lett. **226**. P. 1.
2. Проблемы возникновения и сущности жизни / Под ред. А. И. Опарина, К. Б. Серебровской, Е. С. Панцхавы и др. М., 1973.
3. Tverdislov V.A., Khundzhua G.G., Yakovenko L.V. // Oceanic and Anthropogenic Controls of Life in the Pacific Ocean / Ed. by V.I. Ilyichev, V.V. Anikiev. The Netherlands: Kluwer Academic Publ., 1992. P. 139.
4. Твердислов В.А., Яковенко Л.В. // Росс. хим. журн. (Журн. Росс. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева.) 2000. **44**, № 3. С. 21.
5. Яковенко Л.В., Твердислов В.А. // Биофизика. 2003. **48**, № 6. С. 1137 (Biophys. 2003. **46**, N 3. P. 1053).
6. Твердислов В.А., Яковенко Л.В. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2008. № 3. С. 3 (Moscow University Phys. Bull. 2008. **63**, N 3. P. 151).
7. Tverdislov V.A., Yakovenko L.V. // Evolutionary Biochemistry and Related Areas of Physicochemical Biology / Ed. by V. F. Poglazov et al. Moscow Bach Inst. of Biochemistry & ANKO, 1995. P. 115.

8. Твердислов В.А., Кузнецова М.Р., Яковенко Л.В. // Биофизика. 1992. **37**, № 2. С. 391.
9. Яковенко Л.В., Шкуринов А.П., Даюй Ч. и др. // Росс. хим. журн. (Журн. Росс. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева.) 2007. **51**, № 1. С. 120.
10. Pross A. // Origin of Life and Evolution of the Biosphere. 2004. **34**. P. 307.
11. Deamer D., Dworkin J.P., Sandford S.A. et al. // Astrobiology. 2002. **2**, N 4. P. 371.
12. Wachtershauser G. // Molecular microbiology. 2003. **47**, N 1. P. 13.
13. Блюменфельд Л.А. Проблемы биологической физики. 2-е изд. М., 1977.
14. Deamer D.W. // Microbiol. and Molec. Biol. Rev. 1997. **61**, N 2. P. 239.
15. Твердислов В.А., Сидорова А.Э., Яковенко Л.В. Биофизическая экология. М., 2012.
16. Kotabayasi M. // J. Meteorol. Soc. Jap. Ser. 11. 1962. **40**. P. 25.
17. Хорн Р. Морская химия. М., 1972.
18. Хунджуа Г.Г., Гусев А.М., Андреев Е.Г. и др. // Изв. АН СССР, ФАО. 1977. **13**, № 7. С. 753.
19. Федоров К.Н., Гинзбург А.И. Приповерхностный слой океана. Л., 1988.
20. Караваева Е.В., Исламова М.Р., Твердислов В.А., Хунджуа Г.Г. // Океанология. 1990. **30**, № 2. С. 228.
21. Савенко В.С. Химия водного поверхностного микрослоя. Л., 1990.
22. MacIntyre F. // J. Geophys. Res. 1972. **77**, N 27. P. 5211.
23. Хентов В.Я. Физико-химия капельного уноса. Ростов-на-Дону, 1979.
24. Goodridge C.L., Hentschel H.G.E. // Phys. Rev. Lett. 1999. **82**, N 15. P. 3062.
25. Dodson C.M., Ellison G.B., Tuck A.F., Vaida V. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2000. **97**, N 22. P. 11864.
26. Donaldson D.J., Terahattu H., Tuck A.F., Vaida V. // Origin of Life and Evolution of the Biosphere. 2004. **34**. P. 57.
27. Мазуров М.Е., Калюжный И.М. // Третья международная конференция «Системный анализ и информационные технологии». М., 2009. С. 419.
28. Калюжный И.М. // Программные продукты и системы. 2011. № 2. С. 6.
29. Мазуров М.Е. Идентификация математических моделей нелинейных динамических систем. М.; Ижевск, 2008.

An autowave model of vesicle formation on the ocean surface

V. A. Tverdislov^{1,a}, L. V. Yakovenko^{1,b}, M. E. Mazurov², I. M. Kaluzhny²

¹Department of Biophysics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

²Moscow State University of Economics, Statistics and Informatics, Moscow 119501, Russia.

E-mail: ^a tverdislov@mail.ru, ^b leo.yakovenko@mail.ru.

According to the hypothesis of the origin of life on Earth proposed by the coauthors of this publication [4–6], when an aerosol particle that was generated by bursts of air bubbles on the surface of an ancient ocean and was covered by a monolayer of amphiphile fell back on the surface it was transformed into a vesicle covered by a bilayer of amphiphilic molecules. The vesicle is considered as a cell prototype because it is in a thermodynamically nonequilibrium state caused by asymmetry of the distributions of ions and chiral components. In this work, the ocean surface layer is considered as an active medium that can be described by the Fitzhugh–Nagumo equations. A computational experiment showed that a stable vesicle covered by a bilayer of amphiphilic molecules can be formed under such conditions and that it submerges.

Keywords: spontaneous generation of life, origins of cell predecessors, lipid bilayer of a vesicle, ocean surface microlayer, Fitzhugh–Nagumo equations.

PACS: 68.43.Hn, 82.70.Rr, 87.10.Ed, 87.16.A–, 87.16.D–.

Received 1 July 2014.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 6(2014).

Сведения об авторах

1. Твердислов Всеволод Александрович — докт. физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой; тел.: (495) 939-11-95, e-mail: tverdislov@mail.ru.
2. Яковенко Леонид Владимирович — докт. физ.-мат. наук, доцент, профессор; тел.: (495) 939-30-05, e-mail: leo.yakovenko@mail.ru.
3. Мазуров Михаил Ефимович — докт. физ.-мат. наук, профессор, профессор; тел.: (499) 242-87-88, e-mail: mazurov37@mail.com.
4. Калюжный Илья Михайлович — вед. инженер; тел.: (499) 619-43-63, e-mail: shahhmatist@mail.ru.