

ISSN 2500-316X (Online)

<https://doi.org/10.32362/2500-316X-2020-8-1-43-57>



УДК 577.337; 538.931

Динамика электросолитона в термализованной молекулярной цепи

В.Н. Каданцев^{1,@},

А.Н. Гольцов²,

М.А. Кондаков¹

¹МИРЭА – Российский технологический университет, Москва 119454, Россия

²School of Applied Sciences, Abertay University, Dundee, UK

@Автор для переписки, e-mail: appl.synergy@yandex.ru

В статье теоретически в квазиклассическом приближении исследуется динамика электросолитона в α -спиральной белковой структуре при наличии внешнего окружения. α -спиральные молекулы белка являются динамически организованными системами, свойства и биологические функции которых обусловлены как особенностями их строения, так и особенностями динамического поведения. Транспорт избыточных электронов вдоль α -спиральных белков определяется специфическими свойствами этих молекул. Благодаря асимметричному распределению плотности электрического заряда в пептидной группе (ПГ), они обладают значительным постоянным электрическим дипольным моментом. Ранее авторами было показано, что в результате взаимодействия с окружением (внутриклеточной средой) в α -спиральных молекулах могут возбуждаться как акустические колебания (Фрелиховский режим), так и возбуждения типа уединенных волн – солитонов (Давыдовский режим). При этом понятие «солитон» применяется не только в строгом математическом смысле, т.е. для полностью интегрируемых гамильтоновых систем, но и для обозначения динамически стабильных нелинейных коллективных образований. Такие солитоны в цепочке ПГ способны захватывать внешний электрон от донора. Динамические уравнения, описывающие движение одномерного акустического солитона с захваченным зарядом (электроном), представляют собой в континуальном приближении самосогласованную систему, состоящую из временного уравнения Шредингера с деформационным потенциалом и неоднородного линейного волнового уравнения для этого потенциала. Эта система, которая в литературе называется уравнениями Захарова, имеет важное общезначимое

значение и, как правило, описывает нелинейное взаимодействие двух физических подсистем: быстрой и медленной. В результате аналитического и численного моделирования показано, что при значениях параметра электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ), превышающих некоторую пороговую величину, избыточный электрон может перемещаться вдоль термализованной цепочки ПГ в форме электросолитона (ЭС). В статье также обсуждаются приложения полученных результатов к описанию механизма эффективного транспорта электрона в квазилинейных белковых макромолекулярных структурах.

Ключевые слова: α -спиральные белки, солитоны, электросолитон, фононы, коллективные возбуждения.

Для цитирования: Каданцев В.Н., Гольцов А.Н., Кондаков М.А. Динамика электросолитона в термализованной молекулярной цепи. *Российский технологический журнал*. 2020;8(1):43-57. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2020-8-1-43-57>

Electrosoliton dynamics in a thermalized molecular chain

Vasiliy N. Kadantsev^{1,@},
Alexey N. Goltsov²,
Mikhail A. Kondakov¹

¹MIREA – Russian Technological University, Moscow 119454, Russia

²School of Applied Sciences, Abertay University, Dundee, UK

@Corresponding author, e-mail: appl.synergy@yandex.ru

The possibility of the electrosoliton formation in α -helical proteins which represents a localized state of an extra electron bound with the deformation region of the α -helix arising due to the electron interaction with chain of peptide groups is investigated in a quasiclassical approximation. Two possible mechanisms of the formation of collective dynamic modes in the form of Fröhlich collective mode and Davydov soliton were previously suggested by the authors. In this paper, we developed a unified quantum-mechanics approach to describe conditions of the formation of the Fröhlich vibronic state and Davydov soliton in α -helical protein molecules interacting with the environment. The concept of "soliton" is used not only in the strict mathematical sense, i.e. in the case of completely integrable Hamiltonian systems, but also to describe dynamically stable, nonlinear collective structures. Davydov solitons are stable due to a small probability of the dissipation of its energy into thermal energy which provides a high efficiency of soliton transport of energy, charges, and conformation changes in biosystems at a physiological temperature of 310 K.

Electrosolitons can be formed if the value of electron–phonon interaction (EPI) parameter exceeds a certain threshold. One of the most important characteristics of the electrosoliton's state is the coupling energy of a quasi-particle (exciton or electron) with molecular chain deformation, which also determines the soliton stability. Dynamic equations describing the motion of a one-dimensional electrosoliton in the continuum

approximation are a self-consistent system which includes the time-dependent Schrödinger equation with a deformation potential and an inhomogeneous linear wave equation for this potential. This system, known as the Zakharov system, has significance in physics and, generally, describes the nonlinear interaction of two physical subsystems: fast and slow. Zakharov equations have a well-known soliton solution in the hyperbolic secant form, describing the envelope profile of the high-frequency vibrations of a fast subsystem, which can propagate with any subsonic velocity. The suggested mechanism of emergent of macroscopic dissipative structures in the form of electrosolitons in α -helical proteins is discussed in connection with recent experimental data on long-lived collective protein excitation in the terahertz frequency region.

Keywords: α -helical protein, electrosoliton, autolocalization states, hydrogen bonds, phonon, dynamical regimes, soliton.

For citation: Kadantsev V.N., Goltsov A.N., Kondakov M.A. Electrosoliton dynamics in a thermalized molecular chain. *Rossiiskii tekhnologicheskii zhurnal* = *Russian Technological Journal*. 2020;8(1):43-57 (in Russ.). <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2020-8-1-43-57>

Введение

Жизненные процессы в клетках происходят при непосредственном участии белков – гигантских цепочечных молекул, составленных из различных аминокислот и имеющих определенную структуру. Структура белка обеспечивает выполнение им заданного числа функций, поэтому для каждого вида белка имеется определенная структура [1, 2]. Перед биофизикой стоит задача описания строения, свойств и функционирования простейших биологических систем (ферментов, структурных белков и др.), входящих в состав клеток живых организмов. Непрерывное, эффективное снабжение энергией, химическими веществами и электрически заряженными частицами (электронами, протонами) различных подсистем живых организмов – необходимые условия для их функционирования. Многие биологические процессы связаны с переносом энергии и электрических зарядов вдоль белков. Так, например, осуществляется электронный транспорт в фотосинтезирующих системах, по дыхательным путям митохондрий и др. В ряде случаев электроны перемещаются на расстояния в несколько десятков ангстрем. Механизм переноса электронов без значительных потерь на большие расстояния остается пока невыясненным.

Среди поиска различных подходов к решению названных проблем представляет интерес возможность использования методов теории твердого тела, связанных с представлением об элементарных возбуждениях коллективных степеней свободы [3]. Такие возбуждения (коллективные моды) формируются в многокомпонентных конденсированных средах и определяют динамическое поведение соответствующих систем и выполняемые ими функции. Предполагается, что эти задачи могут быть решены на основе знания атомного состава основных биологических элементов (внутриклеточных структур) при учете внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий и вызываемых ими конформационных изменений макромолекул, а также перемещений энергии, электронов и протонов, как вдоль молекул, так и между ними.

Структура белков и их роль в транспорте энергии и заряда. Многочисленные экспериментальные данные указывают на то, что в белках существует возможность для передачи изменений в электронной структуре или перемещения энергии. Так, Сент-Дьердьи,

установил, что осуществление окислительного процесса пространственно разделенных цитохрома *a*, цитохрома *b* и цитохрома *c* возможно только в случае переноса электрона между ними [3]. Аналогичное явление наблюдалось с ферментом каталазой, в котором четыре геминовые группы связаны с белком. Каталитическая активность трех геминовых групп изменяется, когда к четвертой присоединяется инактивирующий ее реагент. Это означает, что активность фермента каталазы определяется совместным действием всех четырех геминовых групп, т.е. геминовая группа каталазы обладает делокализованной *p*-электронной системой. Для объяснения изложенных результатов Сент-Дьердьи высказал гипотезу [3] о собственной проводимости белков, которая хотя и не подтвердилась, но натолкнула исследователей на мысль о необходимости объяснения биологических проблем с точки зрения квантовой механики, с учетом электронной системы белков. Гипотеза Сент-Дьердьи стимулировала многочисленные экспериментальные и теоретические исследования белков [5–7].

В 1938 г. известный физик П. Иордан [4] высказал предположение о важной роли коллективных свойств биологических макромолекул в осуществлении переноса электронов и энергии бестоковых возбуждений на большие (в молекулярных масштабах) расстояния.

Согласно рентгеноструктурным и прочим данным [2, 5–7] молекулы белков содержат значительные квазиупорядоченные спиралевидные (α -спирали) или складчатые (β -складчатые структуры) участки. Устойчивость этих квазиодномерных периодических структур обуславливается водородными связями между C=O и N–H фрагментами двух пептидных групп O=C–N–H, входящих в различные звенья периодической структуры (рис. 1). Периодичность следования пептидных групп (ПГ) позволяет использовать методы теории твердого тела для исследования энергетической структуры белков. Однако для решения проблемы, например, проводниковых свойств белков, потребуется провести еще немало теоретических исследований, чтобы удовлетворительно объяснить различные свойства белков и понять их биологическую роль.

Представления о коллективных возбуждениях в биомacroмолекулах широко используются при исследовании одного из центральных вопросов биоэнергетики – выяснении причин высокой эффективности переноса энергии, электронов и протонов в пределах одной макромолекулы и между молекулами [9–16]. Теория солитонного «транспорта» энергии и зарядов в α -спиральных белках развита в работах А.С. Давыдова [12–14]. Теоретическим исследованиям солитонов в молекулярных системах посвящено большое количество работ (с библиографией можно ознакомиться в [15, 16, 22]). В подавляющем большинстве этих работ молекулярные системы рассматриваются как изолированные физические системы (без учета теплового движения и взаимодействия с окружающей средой), структура которых подобна структуре их биологических оригиналов (аналогов). Однако, биологические системы различного уровня организации, являются открытыми системами и их функционирование (сложная динамика) во многом определяется взаимодействием с окружением. Так, в [17–19] показано, что в α -спиральных белках могут формироваться коллективные возбуждения солитонного типа (вибросолитоны), обусловленные «накачкой» фононами, поступающими в биомолекулярную систему из ее окружения.

В данной статье рассматриваются некоторые теоретические представления о коллективных возбуждениях в α -спиральной белковой макромолекуле, взаимодействующей

с окружающей средой, при наличии в системе избыточной заряженной частицы. Цель настоящей работы – теоретически исследовать возможность захвата «избыточного» заряда в результате взаимодействия коллективных возбуждений (мод) в цепи пептидных групп – вибросолитонов, с электроном. Такие коллективные возбуждения, представляющие собой связанное состояние электрона с солитоном фононного (вибронного) типа в полипептидной цепи, могут осуществлять «транспорт» электрических зарядов в биологических системах.

Результаты и их обсуждение

Модель взаимодействия электрона со смещениями молекул в полипептидной цепочке

При описании движения заряда, перемещающегося в мягкой молекулярной структуре, в случае сильной связи со смещениями молекул из равновесных положений нельзя применять теорию возмущений. Отказ от использования теорий возмущений приводит к описанию движения заряда с помощью нелинейных уравнений. Их решение показывает, что движение заряда в этом случае сопровождается локальной деформацией решетки и в одномерной цепочке описывается волновой функцией в виде уединенной волны – солитона.

В целом ряде работ [12–19] для описания движения заряда, в качестве модели рассматривается одномерная цепочка, образованная одинаковыми молекулами, расположенными на расстоянии a друг от друга. Повторяющиеся группы молекул обладают постоянными, направленными вдоль цепочки дипольными моментами. Такая система моделирует одну из цепей в α -спиральной белковой молекуле или ацетанилиде (АЦН), в которых пептидные группы (молекулы) соединяются водородными связями. Распределение электрических зарядов на атомах, входящих в состав пептидной группы (рис. 1а), таково, что каждая группа обладает значительным (порядка 3.5 Д) дипольным моментом. Схема расположения постоянных электрических дипольных моментов в α -спиральной молекуле белка изображена на рис. 1б.

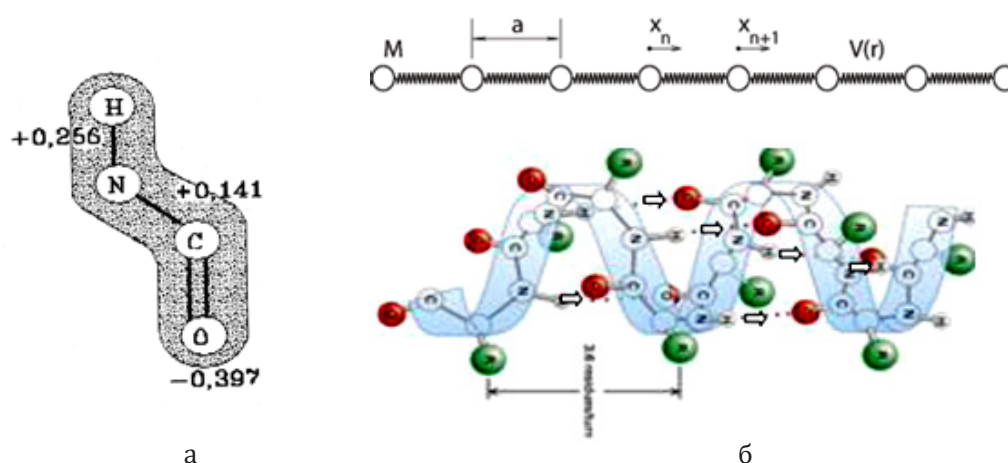


Рис. 1. Распределение электрических зарядов на атомах пептидной группы (а);

Модель одномерной молекулярной цепи показана на верхнем рисунке (б).

Все молекулы (пептидные группы) расположены вдоль оси x на расстоянии a друг от друга, имеют одинаковую массу M . Взаимодействие между молекулами описывается одним потенциалом $V(r)$, где r – изменение расстояния между молекулами.

Направления дипольных моментов указано стрелками на нижнем рисунке [13, 18].

В работе [13] показано, что в поле такого диполя электрон может находиться в связанном состоянии с энергией связи порядка 0.9 эВ. В каждой цепочке водородных связей в спиральном белке пептидные группы образуют периодически повторяющиеся потенциальные ямы для внешнего заряда.

Для электрона, попавшего в цепочку, перекрывание его волновых функций в соседних ямах приводит к коллективизации этих состояний и формированию зоны проводимости [7, 12]. Следует отметить, что перекрывание волновых функций зарядов в различных цепочках, менее существенно и им можно пренебречь. Это позволяет рассматривать движение заряда в каждой цепочке α -спирального белка (или АЦН) независимо.

Показано, что в такой системе в результате *взаимодействия электрона с вызванной им же локальной деформацией цепи* может образовываться автолокализованное состояние – *давидовский электросолитон* (ДЭС) [12, 14–16].

Одной из наиболее важных характеристик автолокализованного состояния является энергия связи квазичастицы (электрона) с деформацией молекулярной цепи, определяющей, в том числе, и стабильность солитона. ДЭС являются достаточно стабильными из-за малой вероятности диссипации их энергии в тепловую, что обеспечивает высокую эффективность солитонного транспорта энергии, конформационных изменений и электрических зарядов в биосистемах при физиологических температурах порядка 310 К.

Предполагается, что постоянные дипольные электрические моменты ПГ достаточно жесткие, так что *под влиянием электрона* происходят только смещения их равновесных положений. Такой «дозвуковой» давидовский электросолитон, может формироваться только, если групповая скорость указанного волнового пакета V_{sol} меньше скорости продольного звука V_0 в цепи без электрона: $V_{sol} < V_0$. Здесь $V_0^2 = a^2 \left(\frac{\chi}{M} \right)$, а χ – продольная упругость цепи [15, 16].

Рассмотрим далее энергетические состояния одного лишнего электрона в цепочке пептидных групп. При отсутствии внешнего магнитного поля спин электрона можно не учитывать. В приближении эффективной массы такая система характеризуется гамильтонианом [15]

$$H = H_e + H_{ph} + H_{int},$$

где

$$H_e = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(E_0 - \frac{\hbar^2}{m^* a^2} \right) |\phi_n|^2 - \frac{\hbar^2}{2m^* a^2} (\phi_{n+1} + \phi_{n-1}) \phi_n, \quad (1)$$

$$H_{int} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sigma_1 |\phi_n|^2 (U_{n+1} + U_{n-1}) + \sigma_2 (U_n + U_{n-1}) (\phi_n^* \phi_{n-1} + \phi_{n-1}^* \phi_n), \quad (2)$$

$$H_{ph} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{M \dot{U}_n^2}{2} + \varphi (U_{n+1} - U_n). \quad (3)$$

Здесь U_n – смещение n -ой пептидной группы из своего положения равновесия, $m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 I}$ – эффективная масса электрона в зоне проводимости, выражающаяся через

интеграл обменного взаимодействия I . E_0 – уровень отсчета энергии электрона в недеформированной цепи (энергия дна зоны проводимости); $\Delta E = \frac{2\hbar^2}{m^* a^2}$, σ_1 – нерезонансный параметр нелинейности электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ), а $\sigma_2 = \frac{3\hbar^2}{2m^* a^3}$ – резонансный параметр нелинейности ЭФВ. Функция $\psi(\rho)$ характеризует потенциал водородной связи; ρ – деформация водородной связи. ϕ_n – волновая функция электрона в узельном представлении, нормированная условием

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |\phi_n|^2 = 1. \quad (4)$$

Если отсчитывать энергию электрона от уровня $\left(E_0 - \frac{\hbar^2}{m^* a^2}\right)$, то гамильтоновой функции (1) соответствует следующая система уравнений движений

$$i\hbar\dot{\phi}_n = -I(\phi_{n+1} + \phi_{n-1}) + \sigma_1\phi_n(\rho_n + \rho_{n-1}) + \sigma_2(\rho_{n-1}\phi_{n-1} + \rho_n\phi_{n+1}), \quad (5)$$

$$M\ddot{U}_n = \psi(\rho_n - \rho_{n-1}) + \sigma_1(|\phi_{n+1}|^2 - |\phi_{n-1}|^2) + \sigma_2[\phi_n(\phi_{n+1}^* - \phi_{n-1}^*) + \phi_n^*(\phi_{n+1} - \phi_{n-1})] \dots \quad (6)$$

Здесь $\rho_n = U_{n+1} - U_n$ – деформация n -ой водородной связи.

В результате теоретических расчетов [15, 16] энергии сродства электрона и ширины зоны проводимости ΔE получены следующие значения:

$$\Delta E = 2 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}, I = 5 \cdot 10^{-20} \text{ Дж и } \sigma_2 = 3.3 \cdot 10^{-10} \text{ Н}.$$

Теоретический расчет величины параметра деформационного потенциала дает значение $\sigma_1 = (4.15 \div 4.36) \cdot 10^{-10} \text{ Н}$, что практически совпадает с экспериментальной оценкой этого параметра [13–15]. При этом и система уравнений (5)–(6) и расчет параметров цепочки справедливы при условии, что постоянные дипольные моменты пептидных групп достаточно жесткие, так что под влиянием электрона происходит только смещение их равновесных положений. Выбранные таким образом параметры молекулярной системы (соответствующей полипептидной цепочке в α -спиральном белке) определяют максимальную скорость избыточного электрона в ней: $V_e = \frac{2aI}{\hbar} = 4.27 \cdot 10^5 \text{ м/с}$, что на два порядка превышает скорость продольного звука в такой цепочке V_{ac} . Это свидетельствует о том, что система «цепочка – электрон» является жесткой – характерные времена фоновой системы на два порядка превосходят характерное время динамики электрона.

При наличии большого ангармонизма, наблюдаемого в некоторых одномерных молекулярных системах, могут формироваться возбуждения типа акустических солитонов [14, 15]. Такие возбуждения возникают при значительном смещении конечных молекул цепочки из равновесных положений (сжатии). Образовавшийся при этом акустический солитон представляет собой перемещающиеся вдоль молекулярной цепочки локальные смещения молекул из положений равновесия. В результате численного моделирования [15, 16] показано (см. рис. 2), что при рассматриваемом способе возбуждения цепочки

(начальной деформации) в ней формируется акустический сверхзвуковой (со скоростью солитон, способный переносить внешний электрон.

Вероятность P захвата электрона акустическим солитоном и образования связанного состояния зависит от параметров σ_1 и σ_2 . Результаты расчетов величины P от указанных параметров приведены в таблице [15, 16].

Из приведенной таблицы видно, что в процессе захвата электрона акустическим солитоном важную роль играют оба механизма электрон-фононного взаимодействия, учтенные в гамильтониане H_{int} (3): нерезонансный, характеризуемый σ_1 и резонансный, приводящий к понижению дна зоны проводимости для избыточного электрона в цепочке, характеризуемый параметром σ_2 . Однако в подавляющем большинстве работ, посвященных данному вопросу, второй член в (3) не учитывается. Таким образом, при значениях параметров ЭФВ $\sigma_1 = (4.15 \div 4.36) \cdot 10^{-10}$ Н, полученных путем аналитических расчетов, изменения энергии взаимодействия избыточного электрона с зарядами (жесткими диполями) мягкой полипептидной цепочки при малых смещениях молекул из равновесных положений, и $\sigma_2 = 3.33 \cdot 10^{-10}$ Н захват избыточного электрона акустическим солитоном в рассматриваемой цепочке происходит с вероятностью $P \sim 0.27$.

Из-за жесткости системы описанный процесс образования связанного состояния «электрон – акустический солитон» возможен только в случае, если одновременно с попаданием электрона в решетку образуется значительная локальная деформация, приводящая к образованию акустического солитона. В противном случае электрон будет перемещаться по цепочке в виде расплывающегося волнового пакета.

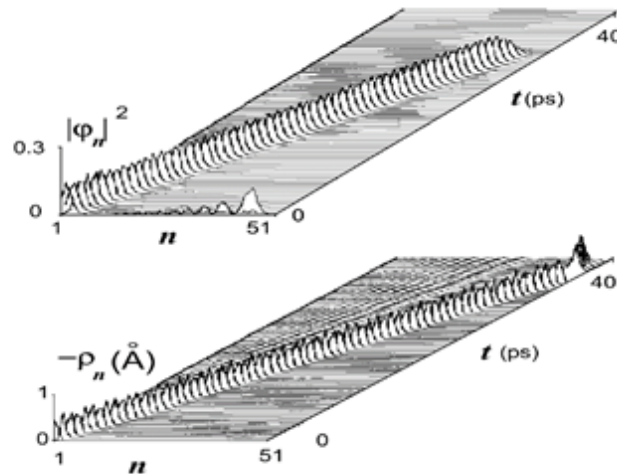


Рис. 2. Результаты расчета захват избыточного электрона, помещенного в начальный момент времени на первую молекулу цепочки, акустическим солитоном с энергией $E = 0.49$ эВ. Солитон возбуждается смещением в начальный момент времени первой молекулы из положения равновесия [15, 16].

Зависимость вероятности P захвата электрона акустическим солитоном от величины параметров σ_1 и σ_2 (Н)

σ_1	0	$1 \cdot 10^{-10}$	$2 \cdot 10^{-10}$	$3 \cdot 10^{-10}$	$4 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{-10}$
σ_2	0	0	0	0	$0.03 \cdot 10^{-10}$	$0.07 \cdot 10^{-10}$
P	0.07	0.10	0.17	0.23	0.26	0.30

Для избыточного электрона, попавшего в периодическую одномерную решетку молекул, взаимодействующих с электроном, наличие акустического солитона проявится в виде дополнительной энергии электрона (деформационного потенциала). При этом акустический солитон представляет собой «потенциальную яму» для электрона.

На рис. 3 показаны решения системы уравнений – волновые функции электрона в потенциальной яме, создаваемой акустическим солитоном, соответствующие пяти нижним уровням энергии ($L = 1, 2, 3, 4, 5$).

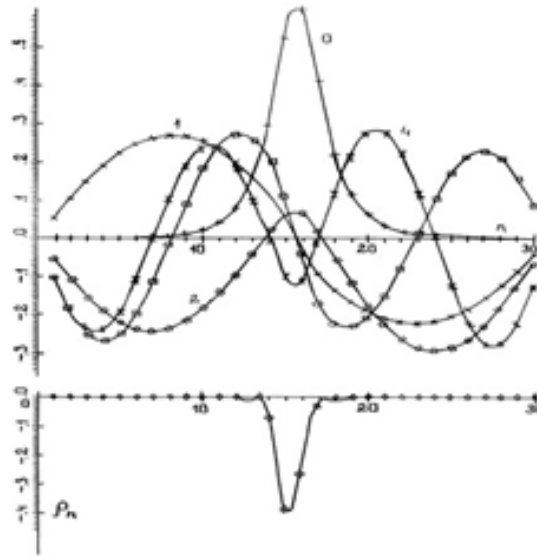


Рис. 3. Волновые функции ϕ_n пяти первых (с $L = 1, 2, 3, 4, 5$) состояний электрона в потенциальной яме, создаваемой акустическим солитоном, и смещений молекул ρ_n в области возбуждения.

$\sigma_1 = 4.5 \cdot 10^{-10}$ Н, $\sigma_2 = 3.3 \cdot 10^{-10}$ Н [15, 16].

Захват избыточного электрона акустическим солитоном в цепочке ПГ, взаимодействующей с окружением

Теоретическое исследование динамических свойств альфа-спирального белка, взаимодействующего с окружением [17–19], показывает, что неустойчивость, вызываемая в цепочке ПГ изменением внешних параметров – свойств окружающей среды, может приводить к образованию новых макроскопических пространственно-временных структур системы, в частности, акустических солитонов вибронного типа [9], формирующихся в цепочках водородных связей в результате фонон-фононных взаимодействий. Уравнение для фононных мод $\beta_s(z, t)$ в этом случае, в континуальном пределе получено в виде [18]:

$$i\hbar \frac{\partial \beta_s(z, t)}{\partial t} + \hbar a^2 I_s \frac{\partial^2 \beta_s(z, t)}{\partial z^2} - E_s \beta_s(z, t) + Q_s |\beta_s(z, t)|^2 \beta_s(z, t) = F_s(z, t), \quad (7)$$

где

$$E_s = \varepsilon_{0s} - e_{0s} - \frac{i\hbar\gamma_s}{2} = E_{s0} - \frac{i\hbar\gamma_s}{2} \quad \text{и} \quad Q_s = \frac{N^2 |V_s|^2}{\Omega_t}.$$

Решение этого уравнения может быть представлено в виде

$$\beta_s(z, t) = \beta_s(\xi) = \Phi_s(\xi) \exp \left\{ i(q_s z - \omega_s t) - \frac{\gamma_s}{2} t \right\}. \quad (8)$$

Здесь $\xi = z - z_0 - V_s t$; V_s – скорость перемещения возбуждения вдоль цепочки пептидных групп, а вещественная амплитуда Φ_s должна удовлетворять условию нормировки:

$$\frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_s^2(\xi) d\xi = N_0. \quad (9)$$

При условии малого затухания $\gamma_s \approx 0$, когда флуктуации также малы, ими можно пренебречь и уравнение для фоновых мод принимает следующий вид:

$$\left[\Xi_s + \hbar a^2 I_s \frac{\partial^2}{\partial z^2} + Q_s |\Phi_s(\xi)|^2 \right] \Phi_s(\xi) = 0, \quad (10)$$

где Ξ_s – спектральный параметр, связанный с энергией фонона соотношением

$$\hbar \omega_s = \Xi_s + E_s + \hbar q^2 a^2 I_s. \quad (11)$$

Это уравнение, представляет собой нелинейное уравнение Шредингера (НУШ) и для любого, не равного нулю Q_s имеет нормированное частное решение в виде уединенной волны (солитона), распространяющейся вдоль оси z . При наличии диссипации $\gamma_s \neq 0$ решение уравнения (10), с учетом соотношений (7)–(8), записывается в следующем виде:

$$\beta_s(\xi) = \left\{ \frac{a \theta_0 N_0}{2} \right\}^{1/2} \frac{\exp[i(q_s z - \omega_s t)]}{\text{ch}[\theta_0 e^{-\gamma_s t} (z - z_0 - V_{sol} t)]}, \quad (12)$$

где $N = N_0 e^{-\gamma_s t}$, а область, занятая уединенной волной – ширина солитона, определяется соотношением:

$$d(t) = \frac{\pi}{\theta_0} e^{\gamma_s t}. \quad (13)$$

При условии малости диссипации в системе и отсутствии связанных с нею флуктуаций указанные решения принимают вид:

$$\Phi_s(\xi) = \left\{ \frac{a \theta_0 N_0}{2} \right\}^{1/2} \frac{1}{\text{ch}[\theta_0 e^{-\gamma_s t} (z - z_0 - V_{sol} t)]}, \quad (14)$$

где $\theta_0 = \frac{Q_s N_0}{4 \hbar a I_s}$ и z_0 – центр солитона.

В этом случае время жизни динамических режимов цепочки пептидных групп, соответствующих нетривиальным решениям, меньше обратных времен релаксации, т.е. $\tau_s < \gamma_s^{-1}$.

Для избыточного электрона, попавшего в рассматриваемую периодическую одномерную решетку молекул, взаимодействующих с электроном, наличие акустического солитона проявится, как отмечалось выше, в виде дополнительной энергии электрона (деформационного потенциала). В результате, электрон может быть «захвачен» акустическим солитоном и в таком связанном состоянии перемещаться вместе с ним в дальнейшем. Возможность такого захвата исследовалась рядом авторов аналитически на континуальных моделях цепочек с различным видом ангармонизма [9, 13–16], но без учета тепловых колебаний и взаимодействий электрона с окружением белка. Некоторые результаты численного моделирования захвата и переноса зарядов акустическими солитонами, в том числе и приведенные выше, указывают на устойчивость обсуждаемых процессов по отношению к внешним возмущениям при физиологических значениях параметров окружающей среды.

Рассмотрим энергетические состояния одного лишнего электрона в цепочке пептидных групп. В приближении эффективной массы такая система характеризуется гамильтонианом (1)–(3).

При слабом влиянии электрона на локальные деформации цепочки в процессе захвата электрона акустическим солитоном важную роль играет нерезонансный механизм электрон-фононного взаимодействия в гамильтониане H_{int} (3), характеризуемый параметром ЭФВ $\sigma_1 = (4.15 \div 4.36) \cdot 10^{-10}$ Н, который определяет изменения энергии взаимодействия избыточного электрона с зарядами (жесткими диполями) мягкой полипептидной цепочки при малых смещениях молекул из равновесных положений.

Состояние избыточного электрона, захваченного солитоном, в приближении эффективной массы электрона m^* , описывается функцией $\phi_e(z, t)$ удовлетворяющей уравнению Шредингера в континуальном приближении:

$$i\hbar \dot{\phi}_e(z, t) - \left\{ \varepsilon_0 - \frac{\hbar^2}{2m^* a^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + W(z, t) \right\} \phi_e(z, t) = 0, \quad (15)$$

где $W(z, t)$ – оператор деформационного потенциала без учета обратного влияния электрона на акустический солитон можно представить в виде

$$W(\xi) = W(z, t) = -\sigma |\beta_s(z, t)|^2 < 0 \quad (16)$$

или, при условии малости диссипации

$$W(\xi) = -\sigma |\Phi_s(\xi)|^2 < 0. \quad (17)$$

Решение уравнения (15) будем искать в виде модулированной волны:

$$\phi_e(z, t) = \Phi_e(x) \exp[i(q_s z - \omega_s t)]. \quad (18)$$

Подставив уравнение (17) в (15) для действительной части амплитуды, получим следующее уравнение:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_T} \frac{d^2}{d\xi^2} + \varepsilon + W(\xi) \right] \Phi_e(\xi) = 0. \quad (19)$$

Энергия электрона, взаимодействующего с локальной деформацией цепи определяется из соотношения:

$$\varepsilon = \hbar\omega - \varepsilon_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} (1 - \tau) - m_T \frac{V_s^2}{2}, \quad (20)$$

где $k = m^*V/\hbar$ и $\hbar\omega$ – энергия электрона в лабораторной системе координат, τ – фактор Дебая-Валлера, учитывающий влияние взаимодействия цепочки с термостатом при температуре T , а $m_T = \frac{m^*}{\tau}$ – эффективная масса «одетого» электрона, зависящая от температуры T .

После подстановки в уравнение (17) выражения $\Phi_s(\xi)$ определяемого соотношениями (9) и (14), получим следующее выражение для деформационного потенциала:

$$W(\xi) = -\frac{\sigma a \theta_0 N_0}{2 \operatorname{ch}^2(\theta_0 \xi)} = \frac{D}{\operatorname{ch}^2(\theta_0 \xi)} < 0. \quad (21)$$

Состояние электрона в потенциальной яме такого вида (рис. 4) рассматривалось Ландау и Лифшицем [20].

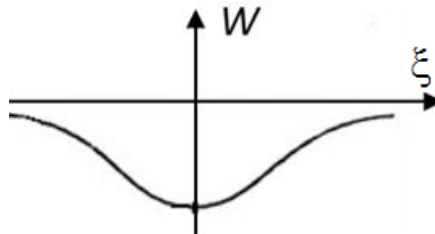


Рис. 4. Деформационный потенциал $W(\xi)$ (21).

Ими показано, что состояние электрона характеризуется спектром отрицательных энергий, определяемым соотношением:

$$\varepsilon_n = -\frac{\hbar^2 \theta_0^2}{2m_T} (\nu - n)^2, \quad (22)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots, n_{\max}$;

Таким образом, имеется конечное число уровней энергии электрона, захваченного акустическим солитоном, с квантовым числом n таким, что:

$$n_{\max} \leq \nu \equiv \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{1 + 8m_T D}{\hbar^2 \theta_0^2}} - 1 \right), \quad (23)$$

при этом нижайший энергетический уровень

$$\varepsilon_0 = -\frac{\hbar^2 \theta_0^2}{2m_T} v^2 \quad (24)$$

характеризуется волновой функцией

$$\Phi_{0e}(\xi) = a\theta_0 \Gamma(v + \frac{1}{2}) / \sqrt{\pi} \Gamma(v) \text{ch}^v(\theta_0 \xi). \quad (25)$$

Здесь Γ – гамма-функция.

При $a = 5 \text{ \AA}$ энергия нижайшего электронного состояния в яме имеет значение

$$\varepsilon_0 \simeq -\frac{am}{2m_T} \theta_0^2 v^2, \quad (26)$$

где m – масса свободного электрона. Захват электрона акустическим солитоном возможен только в том случае, когда $|\varepsilon_0|$ превышает среднюю энергию тепловых колебаний.

Параметры, определяющие состояние захваченного акустическим солитоном внешнего электрона, зависят от температуры цепочки через эффективную массу «одетого» электрона, которая растет с ростом T [15, 21].

Заключение

Результаты проведенного теоретического исследования динамических свойств α -спирального белка, взаимодействующего с окружением, показывают, что в результате захвата «избыточного» заряда деформацией цепи – акустическим солитоном, могут формироваться новые макроскопические структуры. Такие коллективные возбуждения, представляющие собой связанные состояния электрона с солитоном фононного типа в полипептидной цепи, могут осуществлять «транспорт» электрических зарядов в биологических системах.

Приведенные выше соотношения выполняются только при условии, когда взаимодействие акустического солитона с электроном слабо влияет на форму солитона. Однако вопрос о реализации этого и других условий, необходимых для переноса избыточного электрона акустическими солитонами в реальных системах, требует специального исследования.

В результате связи электрона с локальной деформацией рассматриваемой цепи его масса увеличивается, а энергия понижается по отношению к дну зоны проводимости. Это приводит к стабилизации движения электрона, особенно в мягких цепочках при сильной связи электрона с деформацией цепи – акустическим солитоном. При этом электрон движется со скоростью, меньшей скорости продольного звука, не теряя энергию на излучение фононов (эффект Черенкова). Такое перемещение электрона в некотором смысле аналогично движению электрона в сверхпроводящем состоянии металла. На возможность существования в одномерной системе «сверхпроводящего эффекта без спаривания», обусловленного взаимодействием электронов с полем смещений молекул впервые указал Г. Фрелих [10, 11]. Отметим, что до недавнего времени экспериментальное наблюдение таких коллективных возбуждений не представлялось возможным. В настоящее время, в результате бурного раз-

вития экспериментальной техники, разработаны методы исследования, которые становятся важными платформами для фундаментальной проверки отдельных проблем квантовой механики, гравитации, динамики наноструктур и микроорганизмов [23, 24].

Литература:

1. Волькенштейн М.В. Биофизика. СПб.: Лань, 2008. 608 с. ISBN 978-5-8114-0851-1
2. Сердюк И., Заккаи Н., Заккаи Дж. Методы в молекулярной биофизике: структура, функция, динамика: учебное пособие. В 2-х т. Т. 1. М.: КДУ, 2009. 568 с. ISBN 978-5-98227-453-3
3. Szent-Gyorgyi A. Bioenergetics. New York: Acad. press, 1957. 143 p.
4. Jordan P. Über die physikalische Structure organischer Riesenmoleküle. *Naturwissenschaften*. 1938;26(42):693-694. <https://doi.org/10.1007/BF01606595>
5. Атанасов Б.П., Постникова Г.Б., Садыков Ю.Х., Волькенштейн М.В. Изучение переноса электронов в гемопroteинах. *Молекулярная биология*. 1977;11(3):537-544.
6. Hoi W.G.J., Van Duijnen P.T., Berendsen H.J.C. The alpha-helix dipoles and the properties of proteins. *Nature*. 1978;273:443-446. <https://doi.org/10.1038/273443a0>
7. Украинский И.И., Миронов С.И. О природе зоны проводимости в пептидных цепях. *Препринт АН УССР. ИТФ-78-61р*. Киев: ИТФ, 1978. 18 с.
8. Takano T., Swanson R., Kallai O.B., Dickerson R.E. Conformational changes upon reduction of cytochrome c. *Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol.* 1972;36:397-404. <https://doi.org/10.1101/SQB.1972.036.01.051>
9. Takeno S. Vibron solitons in one-dimensional molecular crystals. *Prog. Theor. Phys.* 1984;71(2):395-398. <https://doi.org/10.1143/PTP.71.395>
10. Frohlich H. On the theory of superconductivity: the one-dimensional cases. *Proc. Roy. Soc.* 1954;223(1154):296-305. <https://doi.org/10.1098/rspa.1954.0116>
11. Frohlich H. Electron in lattice fields. *Advance in Phys.* 1954;3(11):325-361. <https://doi.org/10.1080/00018735400101213>
12. Davydov A.S. Influence of electron-phonon interaction on the motion of an electron in a one-dimensional molecular system. *Theor. Math. Phys.* 1979;40(3): 831-840. <https://doi.org/10.1007/BF01032070>
13. Turner I.E., Anderson Y.E., Pox K. Energy eigenvalues and eigen-functions for an electron in an electric-dipole field. *Phys. Rev.* 1968;174(1):81-89. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.174.81>
14. Давыдов А.С. Квантовая теория движения квазичастицы в молекулярной цепи с учетом тепловых колебаний. Киев: ИТФ, 1985. 37 с.
15. Лупичев Л.Н., Савин А.В., Каданцев В.Н. Синергетика молекулярных систем. Динамические свойства дисперсионных структур. LAMBERT Academic Publishing, 2012. 396 с. ISBN-13978-3-659-22114-9.
16. Lupichev L.N., Savin A.V., Kadantsev V.N. Synergetics of Molecular Systems. Springer Series in Synergetics. Springer International Publishing; 2015. 332 p. ISBN 978-3-319-08194-6. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-08195-3>
17. Kadantsev V.N., Kondakov M.A. Collective excitations in α -helix protein molecule interacting with environment. International Forum on Chemical, Biological, Agricultural, Pharmacy and Health Sciences: Conference Proceedings, May 31th, 2017, Madrid, Spain: Scientific public organization «Professional science»; 2017. P. 164
18. Каданцев В.Н., Гольцов А.Н. Коллективные возбуждения в альфа-спиральной молекуле белка. *Российский технологический журнал*. 2018;6(2):32-45. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2018-6-2-32-45>
19. Kadantsev V.N., Goltsov A. Collective excitations in alpha-helical protein structures interacting with environment. *BioRxiv*. 2019. <https://doi.org/10.1101/457580>
20. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1963. 702 с.
21. Ландау Л.Д., Пекар С.И. Эффективная масса полярона. *ЖЭТФ*. 1948;18:419.
22. Давыдов А.С. Солитоны в молекулярных системах. Киев: «Наукова думка», 1984. 288 с.
23. Pettit R.M., Ge W., Kumar P., Luntz-Martin D.R., Schultz J.T., Neukirch L.P., Bhattacharya M., Vamivakas A.N. An optical tweezer phonon laser. *Nat. Photonics*. 2019;13(6):402-405 <https://doi.org/10.1038/s41566-019-0395-5>
24. Romero-Isart O., Pflanzner A.C., Blaser F., Kaltenbaek R., Kiesel N., Aspelmeyer M., Cirac J.I. Large quantum superpositions and interference of massive nanometer-sized objects. *Phys. Lett.* 2011;107(2):Article No. 020405. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.020405>

References:

1. Vol'kenshtein M.V. *Biofizika* (Biophysics). St. Petersburg: Lan'; 2008. 608 p. (in Russ.). ISBN 978-5-8114-0851-1
2. Serdyuk I., Zakkai N., Zakkai Dzh. *Metody v molekulyarnoi biofizike: struktura, funktsiya, dinamika: uchebnoe posobie: v 2-kh t.* (Methods in molecular biophysics: structure, function, dynamics: a training manual: in 2 v.). T. 1. Moscow: KDU; 2009. 568 p. (in Russ.). ISBN 978-5-98227-453-3.
3. Szent-Gyorgyi A. Bioenergetics. New York: Acad. Press; 1957. 143 p.
4. Jordan P. Über die physikalische Structure organischer Riesenmoleküle. *Naturwissenschaften*. 1938;26(42):693-694. <https://doi.org/10.1007/BF01606595>
5. Atanasov B.P., Postnikova G.B., Sadykov Yu.Kh., Vol'kenshtein M.V. An investigation of electron transport in hemoproteins. *Moлекулярnaya biologiya = Molecular biology*. 1977;11(3):537-544 (in Russ.)

6. Hoi W.G.J., Van Duijnen P.T., Berendsen H.J.C. The alpha-helix dipoles and the properties of proteins. *Nature*. 1978;273:443-446. <https://doi.org/10.1038/273443a0>
7. Ukrainskii I.I., Mironov S.I. *O prirode zony provodimosti v peptidnykh tsepyakh* (On the nature of the conduction band in peptide chains). Preprint AN USSR. ITF-78-6Ip. Kiev: ITF; 1978. 18 p. (in Russ.)
8. Takano T., Swanson R., Kallai O.B., Dickerson R.E. Conformational changes upon reduction of cytochrome c. *Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol.* 1972;36:397-404. <https://doi.org/10.1101/SQB.1972.036.01.051>
9. Takeno S. Vibron solitons in one-dimensional molecular crystals. *Prog. Theor. Phys.* 1984;71(2):395-398. <https://doi.org/10.1143/PTP.71.395>
10. Frohlich H. On the theory of superconductivity: the one-dimensional cases. *Proc. Roy. Soc.* 1954;223(1154):296-305. <https://doi.org/10.1098/rspa.1954.0116>
11. Frohlich H. Electron in lattice fields. *Advance in Phys.* 1954;3(11):325-361. <https://doi.org/10.1080/00018735400101213>
12. Davydov A.S. Influence of electron-phonon interaction on the motion of an electron in a one-dimensional molecular system. *Theor. Math. Phys.* 1979;40(3): 831-840. <https://doi.org/10.1007/BF01032070>
13. Turner I.E., Anderson Y.E., Pox K. Energy eigenvalues and eigenfunctions for an electron in an electric-dipole field. *Phys. Rev.* 1968;174(1):81-89. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.174.81>
14. Davydov A.S. *Kvantovaya teoriya dvizheniya kvazichastitsy v molekulyarnoi tsepi s uchetom teplovykh kolebaniy* (A quantum theory of the motion of a quasiparticle in a molecular chain, taking into account thermal vibrations). Kiev: ITF; 1985. 37 p. (in Russ.)
15. Lupichev L.N., Savin A.V., Kadantsev V.N. *Sinergetika molekulyarnykh sistem. Dinamicheskie svoystva dispersionnykh struktur* (Synergetics of molecular systems. Dynamic properties of dispersion structures). LAMBERT Academic Publishing; 2012. 396 p. (in Russ.). ISBN-13978-3-659-22114-9.
16. Lupichev L.N., Savin A.V., Kadantsev V.N. *Synergetics of Molecular Systems*. Springer Series in Synergetics. Springer International Publishing; 2015. 332 p. ISBN 978-3-319-08194-6. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-08195-3>
17. Kadantsev V.N., Kondakov M.A. Collective excitations in α -helix protein molecule interacting with environment. International Forum on Chemical, Biological, Agricultural, Pharmacy and Health Sciences: Conference Proceedings, May 31th, 2017, Madrid, Spain: Scientific public organization «Professional science»; 2017. P. 164
18. Kadantsev V.N., Goltsov A.N. Collective excitations in alpha-helical protein molecule. *Rossiiskii tekhnologicheskii zhurnal = Russian Technological Journal*. 2018;6(2):32-45 (in Russ.). <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2018-6-2-32-45>
19. Kadantsev V.N., Goltsov A. Collective excitations in alpha-helical protein structures interacting with environment. *BioRxiv*. 2019. <https://doi.org/10.1101/457580>
20. Landau L.D., Lifshits E.M. *Kvantovaya mekhanika* (Quantum mechanics). Moscow: Fizmatgiz; 1963. 702 p. (in Russ.)
21. Landau L.D., Pekar S.I. The effective mass of the polaron. *Zhurnal eksperimental'noi i teoreticheskoi fiziki = Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 1948;18:419. (in Russ.)
22. Davydov A.S. Solitons in molecular systems. Kiev: Naukova dumka; 1984. 288 p. (in Russ.)
23. Pettit R.M., Ge W., Kumar P., Luntz-Martin D.R., Schultz J.T., Neukirch L.P., Bhattacharya M., Vamivakas A.N. An optical tweezer phonon laser. *Nat. Photonics*. 2019;13(6):402-405 <https://doi.org/10.1038/s41566-019-0395-5>
24. Romero-Isart O., Pflanzer A.C., Blaser F., Kaltenbaek R., Kiesel N., Aspelmeyer M., Cirac J.I. Large quantum superpositions and interference of massive nanometer-sized objects. *Phys. Lett.* 2011;107(2):Article No. 020405. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.020405>

Об авторах:

Каданцев Василий Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры биокрибернетических систем и технологий Института кибернетики ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). <https://orcid.org/0000-0001-9205-652>

Гольцов Алексей Николаевич, доктор физико-математических наук, лектор Школы Прикладных Наук в Абертей Университете, Великобритания (UK, DD1 1HG, Dundee, Bell Street). Scopus Author ID: 56234051200, ORCID: 0000-0001-6725-189X.

Кондаков Михаил Алексеевич, аспирант кафедры биокрибернетических систем и технологий Института кибернетики ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78).

About the authors:

Vasily N. Kadantsev, Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor of the Department of Biocybernetic Systems and Technologies, Institute of Cybernetics, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow 119454, Russia). <https://orcid.org/0000-0001-9205-652>

Alexey N. Goltsov, Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Lecturer, School of Applied Sciences, Abertay University, Dundee, UK. Scopus Author ID: 56234051200, ORCID: 0000-0001-6725-189X.

Mikhail A. Kondakov, Postgraduate Student of the Department of Biocybernetics Systems and Technologies in the Institute of Cybernetics, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow 119454, Russia).