



ЦУНАМІ У БІЛКОВІЙ МОЛЕКУЛІ

Цунамі – байдужа хвиля.

В.Висоцький

Сучасну біологію та медицину не можна уявити без тісної взаємодії з точними науками: математикою, фізикою, хімією. Результатом такої співпраці стали вражаючі відкриття у галузі молекулярної біології, генної інженерії, нейрофізіології. У цьому нарисі мова піде про один з яскравих та драматичних прикладів проникнення новітніх ідей та методів фізики у науки, які традиційно вивчають Живе.

Все починалося зі, здавалося б, часткової проблеми біоенергетики, – розділу біології, який вивчає механізми перетворення енергії у процесах життєдіяльності організмів.

Добре відомо, що енергетичною валютою на клітинному рівні виступає молекула аденозинтрифосфорної кислоти (АТФ). Необхідна для живих клітин енергія запасується завдяки синтезу, а вивільняється – завдяки гідролізу АТФ. Відповідні біохімічні реакції давно вивчені і не викликають особливих запитань, крім одного: **яким чином енергія, що вивільняється в пункті А в результаті гідролізу молекули АТФ, дістається до кінцевого пункту Б, де ця енергія утилізується з користю для клітини?**

Відстань між пунктами А і Б за молекулярними масштабами чимала – десятки ангстрем (на-



О.С. Давидов (1912–1993 рр.)

гадаємо, що $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$). Щоправда, пункти А і Б з'єднані білковою молекулою, тому основна проблема полягає у тому, щоб пояснити, яким чином енергія транспортується вздовж цієї молекули практично без втрат.

Ось тут і виникли у розробників біомолекулярних моделей нездоланні перешкоди. Виявилось, що відомі механізми транспорту енергії, наприклад, через збудження пружних коливань, не працюють через низьку ефективність передачі, оскільки такі коливання збуджують всю молекулу у цілому. Коливальна енергія дуже швидко «розсмоктується» і не дістається кінцевого пункту. Транспортування енергії по молекулі через збудження електронних

станів, аналогічно до фотобіологічних процесів (фотосинтезу, зоровій рецепції), також не можливе, оскільки енергії гідролізу АТФ для цього не вистачає.

Проблема непокоїла і навіть дратувала науковців надзвичайною простотою формулювання і, водночас, невловимістю рішення. Дійшло до того, що **у 70-і роки ХХ століття на засіданнях міжнародних біофізичних конгресів на порядок денний неодноразово виносилося питання про «кризу» у біоенергетиці.**

«Кризи» вдалося уникнути завдяки фізикам-теоретикам, які взялись допомогти колегам-біофізикам. Важливо відзначити, що ключова ідея, яка пояснювала механізми транспорту енергії в біомолекулярних системах, належить радянському вченому, нашому видатному співвітчизнику – академіку **Олександрі Сергійовичу Давидову**. Саме він запропонував врахувати нелінійні властивості біологічного середовища, у якому поширюються коливальні збудження, а також ввів у наукову лексику дещо парадоксальне поняття «**біологічний солітон**».

Сам термін «солітон» походить від англійського словосполучення *Solitary wave* – «**усамітнена або ізольована хвиля**» – і використовується для означення незвичайних фізичних об'єктів, найвідомішим з яких є цунамі – велетенські хвилі, що утворюються на по-

верхні океанів після землетрусів.

На жителів прибережних поселень це явище здавна наводило жах своїми катастрофічними руйнівними наслідками та якоюсь містичною невідворотністю. Так, було помічено, що ця хвиля може пройти багато сотень кілометрів від епіцентру землетрусу до берега, аніскільки не зменшуючись у розмірах, наче спеціально, щоб завдати максимальної шкоди.

Солітон, як фізичне явище, було відкрито у 1834 р. англійським інженером **Скоттом Расселом**. Цікаво, що до відкриття його підштовхнуло спостереження також своєрідного цунамі, але «рукотворного» та досить мініатюрного: то була одиночна хвиля, що випірнула з-під баржі, яку тягнули коні по вузькому каналу передмістя Едінбурга.

С. Рассел описав незвичайні властивості цих об'єктів, які назвав «хвилями трансляції». Із плином часу вони не зменшувались по висоті, хоча по неглибоких каналах рухались досить повільно, так що їх можна було супроводжувати вершнику. Високі хвилі рухались швидше за низькі, при зустрічі вони не взаємодіяли – просто проходили наскрізь одна через одну. Коні витрачали найменше зусиль для буксування баржі, якщо її швидкість збігалася зі швидкістю «хвилі трансляції».

Публікації С. Рассела спонукали до теоретичних досліджень, і згодом було записано диференціальне рівняння, яке мало рішення у вигляді локалізованого горбу, що переміщується зі сталою швидкістю по поверхні води у неглибокому каналі прямокутного перерізу.

Виявилось, що Расселівська «хвиля трансляції» може виникнути та рухатись, не втрачаючи енергію, завдяки нелінійним властивостям середовища. У лінійному середовищі ізольова-

на хвиля також може виникнути, але вона не здатна довго існувати, а швидко розпливеться.

З вищої математики відомо, що хвильове збурення будь-якої форми можна представити як нескінченну суму гармонічних хвиль, тому ізольовану хвилю часто ще називають «**хвильовим пакетом**». Завдяки явищу дисперсії кожна гармонічна складова має свою власну швидкість розповсюдження у середовищі, а отже, «хвильовий пакет» з плином часу втрачає свою первинну форму (рис. 1-а).

У нелінійному середовищі швидкість розповсюдження залежить ще й від амплітуди гармонічної складової. Можлива ситуація, коли «розпливання» за рахунок дисперсії буде компенсуватися «стягуванням» через нелінійність. Тоді «хвильовий пакет» розповсюджується без зміни своєї форми (рис. 1-б). У подальшому, нелінійне диференціальне рівняння, яке описувало Расселівську «хвилю трансляції», виявилось придатним для опису інших нелінійних явищ у фізиці та техніці.

Чисельні розрахунки, виконані у 50-х роках ХХ ст. на перших електронно-обчислювальних машинах, показали, що усамітнені хвилі можуть виникати у нелінійних молекулярних ланцюгах, і тоді пружні збурення передаються з одного кінця до другого практично без втрат енергії. Саме тоді «солітон» отримав свою назву – за аналогією з іншими відомими квазічастинками – фононами, екситонами, поляритонами.

Власне, результати комп'ютерних експериментів і спонукали О.С.Давидова висловити припущення про те, що ключову роль у передачі енергії по біомакромолекулах грають усамітнені хвилі – солітони, такі собі молекулярні цунамі.

Білкова молекула є полімером, який побудовано з обмеженого набору амінокислот. Ті, у свою чергу, зв'язані одна з од-

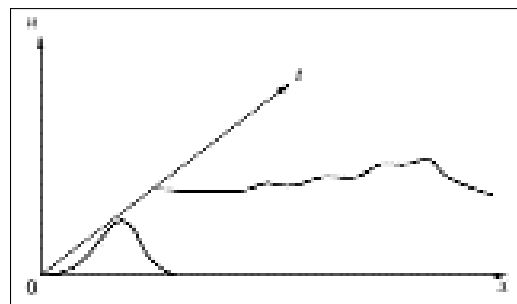


Рис. 1а. Розпливання хвильового пакету унаслідок дисперсії (u – зміщення частинок від положення рівноваги, x – просторова координата, t – час)

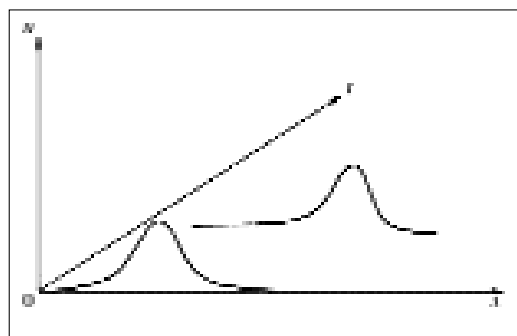


Рис. 1б. Збереження профілю усамітненої хвилі, зумовлене взаємною компенсацією явищ дисперсії та нелінійності

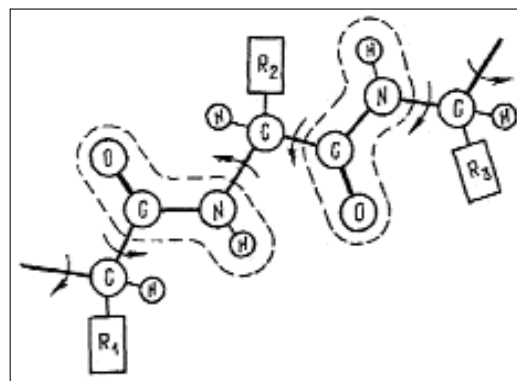


Рис. 2. Ділянка білкової молекули. Пептидну групу обведено штриховою лінією. R_i – бічні групи амінокислот

ною через так званий пептидний зв'язок, який формує місток $O=C-N-H$. Фактично, білкова молекула – це довгий ланцюг однотипних пептидних ланок (рис. 2). Кожна пептидна група може повертатися навколо одинарних зв'язків із сусідніми атомами вуглецю.

На рис. 3 такі повороти вказано стрілками. Можливість

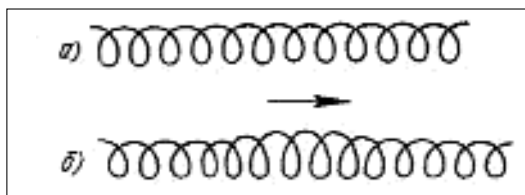


Рис. 3. а) Незбуджена спіральна білкова молекула; б) збудження у молекулі солітона.

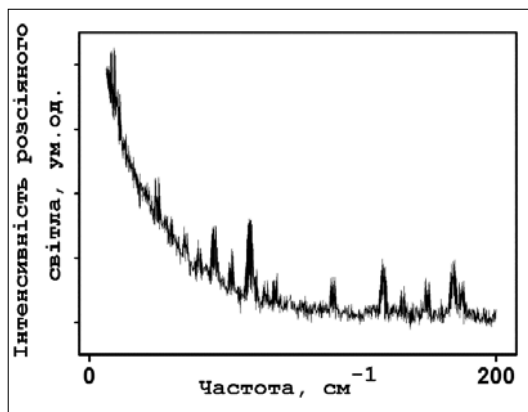


Рис. 4. Спектр комбінаційного розсіяння світла живих клітин. Частота відраховується від лінії лазерного збудження (зі статті С.Вебба у *Physical Reports* за 1980 р.)

обертань зумовлює значну гнучкість довгого білкового ланцюга, що дозволяє йому набувати різних просторових конфігурацій, зокрема, закручуватись у правильну праву спіраль. Розрахунки показують, що деякі типи коливань пептидного зв'язку можуть сформувати солітони, які розповсюджуються у вигляді локальних збурень витків спіралі (рис. 3).

Ідеї О.С. Давидова знайшли активну підтримку серед науковців, і в 70–80-х XX ст. роках було проведено багато комп'ютерних розрахунків, що підтвердили правильність припущень київського фізика.

Але, якими б красномовними та вичерпними модельними розрахунками не були, вирішальним підтвердженням будь-якої теорії є, звичайно, живий експеримент. У цьому сенсі, однак, висловлювалися сумніви: солітони – об'єкти дуже делікатні, уразливі, в експерименті можуть не проявитися, та і в який

спосіб примусити їх переміщуватися по білку?

Допомога надійшла зовсім з іншого боку, звідки її аж ніяк не чекали. Тому полишимо на деякий час солітони, та звернемося до біологічної когерентності **Герберта Фрьоліха**, про яку йшлося у № 4 журналу «Країна знань» за 2008 рік. Нагадаємо, що в рамках цієї концепції жива клітина в стані активного метаболізму утворює **гігантський осцилюючий диполь**, здатний випромінювати та сприймати з довкілля електромагнітні хвилі. Гіпотезу Г. Фрьоліха неодноразово намагалися перевірити експериментально у різний спосіб.

Канадський біофізик **Сідней Вебб** узяв на озброєння метод комбінаційного розсіяння світла, що широко використовується у дослідженнях коливальних спектрів молекулярних систем. Ідея цього методу полягає у наступному. Якщо на зразок спрямувати монохроматичне лазерне випромінювання певної частоти, то спектр випромінювання, розсіяного під кутом 90°, буде містити, окрім частоти лазерного світла, ще й так звані «комбінаційні частоти», що відповідають коливанням молекул. С. Вебб міркував так: якщо активна клітина – це гігантський осцилюючий диполь, то його коливання повинні проявитися на фоні молекулярних.

Канадському вченому довелося подолати неабиякі експериментальні труднощі, бо мутнувата суспензія живих клітин мало нагадує звичайні кристали або прозорі рідини. Однак, результати проведених дослідів перевершили найоптимістичніші очікування.

У спектрі розсіяного живими клітинами світла було зафіксовано цілу низку вузьких ліній, які не відповідали жодним відомим молекулярним коливанням (рис. 4). С. Веббу навіть вдалося зареєструвати

розщеплення спектральних ліній у клітинах злоякісних утворень, що збігалось з умоглядними передбаченнями Г.Фрьоліха.

Пізніше, аналогічні спектри комбінаційного розсіяння світла живих клітин спостерігали й інші дослідники, зокрема, група київських фізиків на чолі з академіком **М.П. Лисицею**. Вважалося, що концепція Г.Фрьоліха отримала суттєве експериментальне підтвердження. А до чого ж тоді біологічні солітони?

Одному з фізиків-теоретиків, що **вів** комп'ютерні розрахунки солітонів у білкових молекулах, випадково потрапила на очі стаття С. Вебба «**Комбінаційне розсіяння живих клітин**», судячи з назви, суто біофізичного спрямування. Аж раптом привернув до себе увагу рядок чисел, що відображав **комбінаційні частоти гіпотетичного клітинкового осцилятора**. Вчений був вражений: практично ті ж самі значення він отримав у власних розрахунках! Аби була зрозуміла реакція дослідника, наведемо порівняльну таблицю (у спектрах комбінаційного розсіяння світла частоту коливань, зазвичай, виражають у хвилювих числах) (див. табл.).

Цей збіг, який згодом називали «разючим», «неймовірним» та навіть «фантастичним», переконливо доводив, що біологічні солітони грають фундаментальну роль у процесах життєдіяльності. Ідеї О.С. Давидова тріумфували!

А як же бути з **біологічною когерентністю** Г. Фрьоліха? Виходить, що експерименти С. Вебба підтверджують зовсім іншу теорію?

Врешті, точки над «і» розставили ті ж фізики-теоретики. Строгий розгляд в рамках квантової механіки коливальних спектрів білкових молекул показав, що обидва підходи впливають з розв'язку од-

	Частота, см ⁻¹								
Теорія	34	51	68	85	91	108	125	159	176
Експеримент	45	52	63	85	90	108	123	152	182

ного хвильового рівняння Шредінгера, в якому враховано усі, зокрема і нелінійні, взаємодії. Когерентність Фрьюліха відповідає статичному (незалежному від часу) розв'язку, а

солітони Давидова – динамічному.

Література:

1. Давидов А.С. Солитоны в биоэнергетике. – 1986. – Наукова Думка, Киев.

2. Филиппов А.Т. Многоликий солитон. Библиотечка «Квант», вып. 48. – 1990. – «Наука», М.

А.В. Якунов,

кандидат фізико-математичних наук, кафедра оптики фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка

ЗАДАЧІ ДЛЯ КМІТЛИВИХ

Усі ви добре знаєте, як необхідне для вашого майбутнього знання математики. А найкраща форма творчої роботи з математики – це розв'язування задач, цікава, хоч і досить важка справа. Ісаак Ньютон писав у своїй «Загальній арифметиці»: «Для вивчення наук задачі корисніші за правила». Вони допомагають зрозуміти красу і велич математики, відчувати радість творчості. Адже важливо не просто знайти розв'язання, воно повинно бути витонченим, гармонічним і про-

стим, що відповідає латинському прислів'ю:

«Простота – печатка істини».

Дивні таємниці математики допоможуть вам побачити такі задачі:

4.1. Трьома двійками, не використовуючи знаків математичних дій, спробуйте написати якнайбільше число.

4.2. Трьома трійками, не використовуючи знаків математичних дій, спробуйте написати якнайбільше число.

4.3. Трьома четвірками, не використовуючи знаків математичних дій, спробуйте написати якнайбільше число.

4.4. З допомогою чотирьох одиниць, не використовуючи знаків математичних дій, спробуйте написати якнайбільше число.

4.5. Чи можливо, використавши усі 10 цифр – 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 і знаки математичних дій, – отримати число 9?

ВІДПОВІДІ Й РОЗВ'ЯЗАННЯ до задач з № 2–3 2009 р.

2.1. Так. Спочатку число A запишемо так: $A = 10a + b$. Після перенесення останньої цифри b цього числа у його початок отримаємо нове число:

$$B = b \cdot 100000 + a.$$

Оскільки число $A = 10a + b = 7a + 3a + b$ ділиться на 7, то на 7 ділиться також число $3a + b$, отже, і число $3B = b \cdot 300000 + 3a = b \cdot 299999 + 3a + b = b \cdot 7 \cdot 42857 + 3a + b$.

Тому на 7 ділиться і число B .

2.2. Братам 2, 5, 8, 11, 14, 17, 20, 23 і 26 років, а їхньому батькові – 48 років.

Нехай n – вік наймолодшого брата, a – проміжок часу, через який народжувалися брати, а m – вік їхнього батька.

За умовою задачі $n + (n + a)^2 +$

$$+ (n + 2a)^2 + \dots + (n + 8a)^2 = 9n^2 + 72na + 204a^2 = (3n)^2 + 2 \cdot 3n \cdot 12a + (12a)^2 + 60a^2 = (3n + 12a)^2 + 60a^2 = m^2.$$

Оскільки $n \geq 1$, $a \geq 1$, з міркувань здорового глузду, $m \leq 100$, а різниця років життя батька і найстаршого сина не менша від 14 років. Шляхом підбору неважко встановити, що мінімальними значеннями прийнятних n і a , при яких виконується рівність $(3n + 12a)^2 + 60a^2 = m^2$, є відповідно $n = 2$, $a = 3$ і, отже, $m = 48$.

2.3. 89. Нехай m і n кількість відповідно десятків і одиниць двозначного числа. Тоді за умовою задачі $10m + n = m + n^2$. Звідси $9m = n(n - 1)$ і оскільки $1 \leq m \leq 9$, $0 \leq n \leq 9$, вимога задачі виконується лише при $m = 8$, $n = 9$.

2.4. 9801. Позначимо x і y кількість відповідно десятків і одиниць двозначного числа, квадрат якого за умовою задачі дорівнює $abcd$, тобто $abcd = (10x + y)^2 = 100x^2 + 20xy + y^2$.

Слід зазначити, що $y \neq 0$, інакше було б $c = d = 0$ і $a = b$, а такого квадрата немає.

Крім того, y не може дорівнювати ані 3, ані 7, оскільки тоді $d = 9$ і із рівності $a = b + d$ випливає, що $a = 9$, а число 9009 не є квадратом.

Число y не може також дорівнювати 4, 5 і 6, оскільки в цьому разі неможливо добрати x так, щоб цифра десятків у числі $20xy + y^2$ дорівнювала нулю.

Із залишених варіантів значень x і y лише $x = y = 9$ відповідає умові задачі: $(99)^2 = 9801$.

2.5. Пенал коштує 10 гривень; у однієї школярки було 9,99 грн, а в іншої грошей зовсім не було.