

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P19-97-384

Б.Ф.Костенко, М.З.Юрьев*

ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ПРИРОДНЫХ АМИНОКИСЛОТ

*Интерпром, Москва

1997

Теоретико-групповая классификация взаимодействий
природных аминокислот

Предложена теоретико-групповая классификация некоторых, найденных эмпирическим путем, взаимодействий природных аминокислот и сделаны экспериментально проверяемые предсказания об отношении интенсивностей этих взаимодействий. Рассматриваются эффекты поляризации электромагнитного вакуума, способные быть ответственными за эти взаимодействия. Обсуждаются перспективы поиска «пятой силы» на расстояниях $l \sim 10^{-8}$ см во взаимодействиях природных аминокислот.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1997

Перевод авторов

Kostenko B.F., Yuriev M.Z.

P19-97-384

Group-Theoretic Classification of Interactions
of the Natural Amino Acids

Group-theoretic classification of empirically established interactions of the natural amino acids is proposed. Experimentally verifiable predictions for intensity ratios of the interactions are given. Electromagnetic vacuum polarization effects appearing to be responsible for these interactions are considered. Perspectives of search of the fifth force on the scale $l \sim 10^{-8}$ sm in the interactions of natural amino acids are discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

1 Введение

Специалистам по молекулярной биологии известна гипотеза, связанная с рядом эмпирических закономерностей, согласно которой природные аминокислоты, синтезированные с помощью противоположных "слов" генетического кода, должны притягиваться друг к другу. Противоположным к коду XYZ , или антикодом, мы называем слово вида $\bar{Z}\bar{Y}\bar{X}$, где X, Y, Z принимают значения A, C, G и U (сокращенные наименования аденинового, цитозинового, гуанинового и урацилового нуклеотидов, являющихся материальными носителями "букв" генетического кода). Черта над символом означает, что его следует заменить противоположным по правилу

$$\bar{A} = U, \bar{U} = A,$$

$$\bar{C} = G, \bar{G} = C.$$

Если воспользоваться таблицей генетического кода, рассматриваемые взаимодействия можно представить в следующем наглядном виде (рис. 1 - 3).

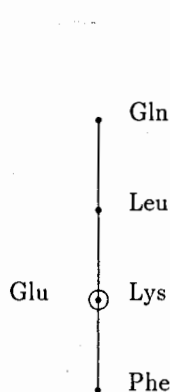


рис. 1

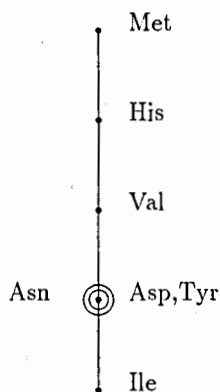


рис. 2

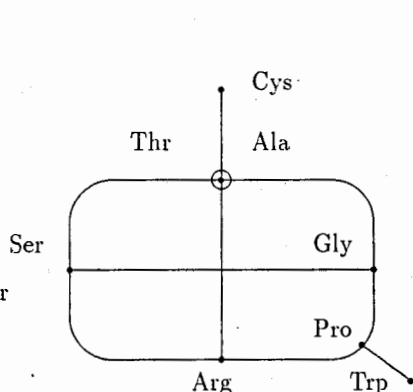
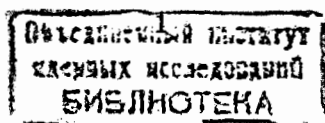


рис. 3

На рисунках 1 — 3 точками обозначены природные аминокислоты, а соединяющие их линии символизируют силы притяжения. Таким образом, согласно обсуждаемой гипотезе, молекулы двадцати встречающихся в живой природе аминокислот располагаются в трех относительно самостоятельных мультиплетах. Оставляя в стороне вопрос о том, насколько хорошо сформулированное правило описывает известные экспериментальные факты, проанализируем некоторые особенности этих взаимодействий.

С формальной точки зрения притяжение молекул внутри 5-плета (рис.1) можно объяснить по аналогии с обычным электростатическим притяжением разноименно



заряженных частиц. Для этого, очевидно, необходимо приписать молекулам Gln, Glu и Lys некоторые положительные, а молекулам Leu и Phe — отрицательные "заряды". Эта простейшая модель, однако, предсказывает существование еще одного взаимодействия, не предусмотренного диаграммой, — между молекулами Gln и Phe. Для согласования модели с обсуждаемым правилом необходимо предположить, что это "лишнее" взаимодействие значительно слабее остальных и поэтому пока не обнаружено (фактически, это означает, что абсолютные величины зарядов молекул Leu, Glu и Lys, расположенных внутри цепочки, значительно больше зарядов Gln и Phe, стоящих по краям диаграммы).

Притяжения молекул, указанные на рис.2, в принципе, можно объяснить точно таким же образом, если допустить существование еще одного заряда. Легко, однако, видеть, что возникающие при этом "лишние" взаимодействия молекул Met и Pe теперь уже должны быть наблюдаемы даже в случае, когда соответствующие им заряды малы (разумеется, если рассматриваемая модель верна). Объяснить же взаимодействия между молекулами 8-плета (рис.3) путем введения еще одного заряда вообще невозможно.

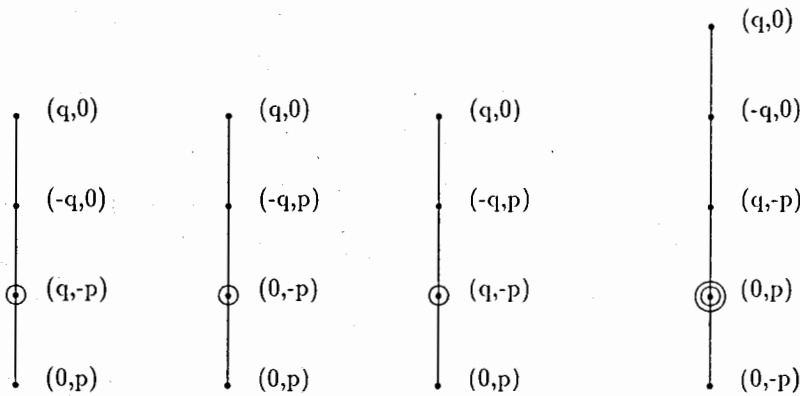


рис. 4 рис. 5 рис. 6 рис. 7

В самом деле, попробуем, например, описать притяжение молекул, расположенных на рис.3 вдоль овала, последовательно приписывая им заряды противоположных знаков. Обойдя всю цепочку по кругу, убеждаемся, что молекулы, отвечающие началу и концу цепочки, обязательно должны отталкиваться. Единственная оставшаяся возможность — предположить, что каждая из молекул характеризуется сразу несколькими участвующими во взаимодействиях зарядами, или, что то же самое, считать новые заряды векторами. Этой точки зрения мы и будем в дальнейшем придерживаться. На этом пути можно не только объяснить притяжение молекул, представленных на рис. 3, но и избавиться от "лишних" взаимодействий

внутри пяти- и семиплетов, полученных выше с помощью простейшей модели со скалярными зарядами.

На рис. 4 – 6 указаны три возможности приписать двухкомпонентные заряды членам 5-плета, а на рис. 7 — единственный допустимый вариант, соответствующий 7-плету. При этом, векторные заряды, относящиеся к разным мультиплетам, считаются различными и, следовательно, не взаимодействующими. Объяснить притяжения молекул, входящих в состав 8-плета, можно только в том случае, если приписать каждому из его членов сразу три компоненты заряда. Возможные варианты расстановки этих зарядов показаны на рис. 8 – 10.

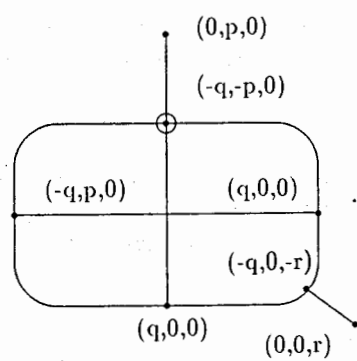


рис. 8

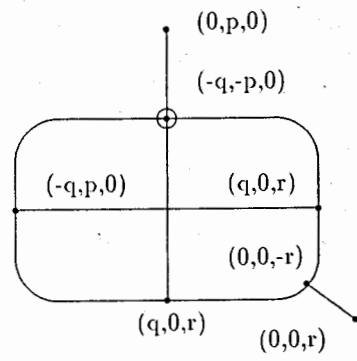


рис. 9

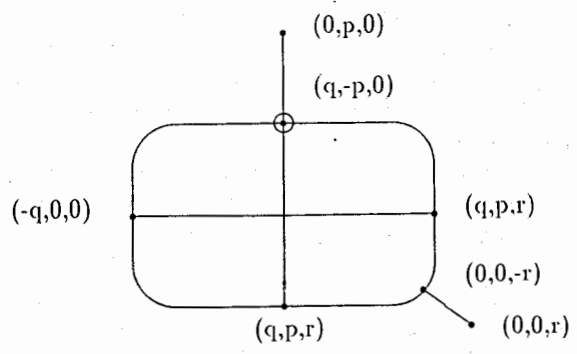


рис.10

Далее, нетрудно понять, что частицы будут притягиваться только в том случае, когда отвечающие им векторные заряды образуют друг относительно друга тупой

$$\vec{Q}_i \vec{Q}_j < 0,$$

и отталкиваться — в противоположном случае. Из этого, в свою очередь, вытекает, что для каждой из схем заполнения 8-плета (рис. 8 – 10) должно либо иметь место неравенство

$$p < q,$$

либо не должна реализоваться одна из связей, указанных на рис. 3 (та, для которой $\vec{Q}_i \vec{Q}_j = q^2 - p^2$). Таким образом, сама топология диаграммы на рис. 3 нам подсказывает, что отдельные компоненты векторных зарядов могут быть **зависимыми** друг от друга. В следующем разделе мы используем некоторые теоретико-групповые соображения, вытекающие из симметрии обсуждаемых взаимодействий, для установления этой предполагаемой зависимости.

Подведем предварительные итоги. Все обсуждаемые особенности взаимодействий природных аминокислот можно объяснить, если приписать им некоторые эффективные "заряды". При этом, пяти- и семиплетам отвечает по четыре, а восьмиплету — шесть зарядов. Итого, имеем $4+4+6=14$ новых зарядов. Одна половина из них положительна, другая — отрицательна. Взаимодействовать могут либо два одинаковых заряда (отталкивание), либо пара зарядов противоположного знака (притяжение).

2 Теоретико-групповой анализ

Естественно предположить, что аминокислоты (элементарные кирпичики, из которых строятся молекулы, входящие в состав живых организмов) подобно протону и нейтрону (из которых построены атомные ядра), а также подобно кваркам (структурным составляющим элементарных частиц) подчинены некоторой **внутренней симметрии**. Иными словами, предположить, что отдельные аминокислоты не являются совершенно независимыми, а переходят друг в друга под действием некоторой группы преобразований.

Среди всех конечномерных представлений классических групп Ли можно указать всего лишь одну, которая учитывает сразу все сформулированные в предыдущем разделе особенности взаимодействий аминокислот. Это — $Sp(14)$. В полной аналогии с тем, как кварки реализуют фундаментальное представление $SU(3)$ и характеризуются 2-мерными векторными зарядами (компонентами которых являются электрический заряд и гиперзаряд), поставим в соответствие каждому из обсуждавшихся зарядов аминокислот один из элементов весовой диаграммы фундаментального представления $Sp(14)$. Элементарные заряды являются в этом случае 7-мерными векторами вида

$$(\pm 1, 0, 0, \dots, 0), (0, \pm 1, 0, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, 0, \pm 1).$$

Подобный выбор отвечает максимально возможной симметрии обсуждаемых взаимодействий — в этом случае все компоненты зарядов одинаковы.

В связи с последним утверждением, интересно отметить, что группа $Sp(2n)$ является в известном смысле обобщением группы унитарных преобразований $SU(n)$. Так если $SU(n)$ имеет смысл группы вращений в n -мерном пространстве векторов с комплексными компонентами, то $Sp(2n)$ описывает вращения в n -мерном гиперкомплексном пространстве, компонентами векторов которого являются кватернионы [1]. Число независимых генераторов (порядок группы) для $Sp(14)$ равно 105, что не позволяет нам здесь их выписать в явном виде, как это обычно делается для фундаментальных представлений $SU(2)$ и $SU(3)$ (где число генераторов равно 3 и 8 соответственно). Задача облегчается, однако, тем, что для построения весовых диаграмм, достаточно задать только матрицы H_j взаимно коммутирующих генераторов группы (подалгебры Картана), которых для $Sp(14)$ имеется только семь¹. Если H_j заданы в диагональном виде, то

$$q_j^{(i)} = (H_{ii})_j, \quad i = 1, \dots, n \leq 7, \quad j = 1, \dots, 7.$$

Разумеется, $Sp(14)$ -симметрия обсуждаемых взаимодействий может быть не совсем точной. В частности, возможно расщепление исходного 14-плета зарядов на два квартета по одной из следующих схем

$$Sp(14) \begin{cases} \rightarrow Sp(4) \otimes Sp(10) \\ \rightarrow Sp(8) \otimes Sp(6) \end{cases} \begin{cases} \rightarrow Sp(4) \otimes Sp(4) \otimes Sp(6) \\ \rightarrow Sp(4) \otimes Sp(4) \otimes Sp(6) \end{cases}$$

В этом случае заряды сопоставляются элементам весовых диаграмм двух фундаментальных представлений группы $Sp(4)$ и одному фундаментальному представлению $Sp(6)$ и являются соответственно 2-мерными и 3-мерными векторами. При такой частично нарушенной симметрии взаимодействия внутри разных мультиплетов осуществляются с разной интенсивностью, а внутри одного — одинаковы.

В случае полного разрушения симплектической симметрии

$$Sp(6) \rightarrow SU(2) \otimes Sp(4),$$

$$Sp(4) \rightarrow SU(2) \otimes SU(2)$$

все элементарные заряды различны. Этот случай показан на рис. 4 — 10 (на которых заряды p и q следует, строго говоря, снабдить индексами, указывающими, к какому из мультиплетов аминокислот они относятся).

Существует одно, хотя и не бесспорное, соображение, позволяющее отдать предпочтение последней схеме из трех, представленных на рис. 8 – 10. Действительно,

¹При расчете весовых диаграмм (а нами были рассмотрены все конечномерные представления всех классических групп Ли) авторы использовали методы, описанные в книгах [2,3]. Для лучшего понимания приведенной теоретико-групповой систематизации напомним, что количество элементов весовой диаграммы всегда равно размерности n представления группы, а число независимых компонент у этих элементов совпадает с рангом группы (размерностью подалгебры Картана).

сформулированное в начале работы правило, если его понимать формально, предсказывает также притяжения молекул Ser и Leu, принадлежащих 8-плету и 5-плету соответственно, ко всем окончаниям белковых цепей, являющихся "продуктами синтеза" терминирующего кодона Tегin. Из трех возможностей, представленных на рис. 4 - 10, только последняя позволяет описать эти притяжения, не предсказывая при этом никаких дополнительных взаимодействий между молекулами 5-ти и 8-ми плетов. При такой интерпретации окончаниям белковых цепей следует приписать двухкомпонентные "заряды" (q_5, q_8).

Таким образом, схема с четырнадцатью зарядами

$$Q_i = (\pm q_5, \pm p_5, \pm q_7, \pm p_7, \pm q_8, \pm p_8, \pm r_8)$$

позволяет описать все обсуждаемые особенности взаимодействий природных аминокислот. При этом, как мы видели, относительные заряды почти всех аминокислот определяются практически однозначно. Иными словами, представленная классификация позволяет сделать вполне однозначные предсказания, касающиеся интенсивностей обсуждаемых взаимодействий, которые пропорциональны произведению соответствующих зарядов.

Описанная модель содержит минимально возможное число зарядов и является в этом смысле наиболее простой. Область допустимых ее модификаций можно очертить, указав другой предельный случай — наиболее сложную из всех возможных схем. В этом случае необходимо предположить, что каждому генетическому коду соответствует свой заряд (так что одна и та же аминокислота может находиться в нескольких состояниях, обладающих разными зарядами) с тем лишь ограничением, что коду и антикоду отвечают однотипные заряды противоположных знаков.

Не представляет труда, по крайней мере в принципе, отличить наиболее простую модель от наиболее сложной с помощью соответствующих измерений. Например, существование у молекул некоторой аминокислоты различных зарядовых состояний, как бы малы эти заряды ни были, неизбежно скажется на симметричных свойствах многочастичных волновых функций этих молекул. Об этом же будет свидетельствовать и отсутствие взаимодействий молекулы некоторой аминокислоты с другими молекулами, если они не были синтезированы с помощью точно противоположного ей кода.

3 Эффекты поляризации вакуума

Взаимодействия, обсуждавшиеся выше, не превышают 0.1 эВ и согласно существующей классификации межмолекулярных сил обусловлены физическими, а не химическими, связями [4]. Поэтому можно предположить, что притяжение молекул в данном случае обусловлено силами Ван-дер-Ваальса, связанными с уменьшением плотности энергии электромагнитного вакуума в зазоре между молекулами (эффект Казимира [5])².

Расчеты таких взаимодействий по теории возмущений в первом исчезающем приближении приводят к следующему выражению для эффективного потенциала взаимодействия

$$U(r) = \frac{i}{2\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega^4 \alpha^{(1)}(\omega) \alpha^{(2)}(\omega) D_{\beta\gamma}(\omega, r) D^{\beta\gamma}(\omega, r),$$

где $D^{\beta\gamma}(\omega, r)$ — фотонная функция Грина, $\alpha^{(p)}(\omega)$ — электрическая поляризуемость взаимодействующего атома сорта $p = 1, 2$ в основном состоянии. Используя скорость света c , частоту переходов ω_0 атома из основного состояния в возбужденные и расстояние r между ними, можно построить безразмерный параметр Ω

$$\Omega = \frac{\omega_0 r}{c}.$$

Выражение для потенциала взаимодействия $U(r)$ принимает особенно простой вид в двух предельных случаях, отвечающих большим и малым расстояниям. Так, при $\Omega \ll 1$ (малые расстояния) имеем формулу Лондона [6]

$$U(r) = -\frac{A}{r^6}, \quad (1)$$

$$A = \frac{3i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \alpha^{(1)}(\omega) \alpha^{(2)}(\omega) d\omega > 0,$$

а при $\Omega \gg 1$ (большие расстояния) — формулу Казимира и Погдера [7]³

$$U(r) = -\frac{23}{4\pi} \hbar c \alpha^{(1)}(0) \alpha^{(2)}(0) / r^7. \quad (2)$$

Из последнего соотношения видно, что роль зарядов в этом случае играют электрические поляризуемости атомов. Притягивающимся зарядам, введенным ранее, могут соответствовать согласующиеся друг с другом участки разных молекул, способные образовывать пространственно-плотные упаковки. Потенциал U и силу взаимодействия $\vec{F} = -\partial U / \partial \vec{a}$ двух соседних участков молекул в первом приближении можно найти непосредственно суммируя потенциалы отдельных пар атомов. Более точный расчет должен принимать во внимание коллективные эффекты

²Взаимодействия молекул, обусловленные эффектом Казимира, должны быть гораздо слабее связей атомов в ковалентных и ионных кристаллах. Связи рассматриваемого вида типичны для органических твердых тел, образующих так называемые молекулярные кристаллы, в которых большие молекулы взаимодействуют друг с другом, не изменяя своей пространственной формы.

³Выражение (1) может быть также получено во втором порядке теории возмущений из нерелятивистской формулы для энергии взаимодействия двух диполей $V \sim \vec{D}^{(1)} \vec{D}^{(2)} / r^3$, если принять во внимание вакуумные флуктуации диполей $\langle \vec{D} \rangle = 0$, $\overline{D^2} \neq 0$. Присутствие скорости света c в соотношении (2) свидетельствует о явном учете в этой формуле эффектов запаздывания взаимодействия.

— взаимодействия с нулевыми колебаниями электромагнитного поля сразу целых групп атомов (их вклад будет тем больше, чем больше поляризуемость отдельных атомов).

В заключение обсудим одну интересную гипотезу о том, могут ли обсуждаемые взаимодействия содержать примесь новой, пока не открытой "пятой" силы⁴. Имеются ли какие-нибудь основания для поисков "пятой" силы во взаимодействиях молекул природных аминокислот? По-видимому, да. Так, еще в 1967 году А.Д. Сахаров предложил интересную квантово-полевую модель, которую естественно назвать моделью индуцированного заряда или взаимодействия [10,11]. Суть механизма индуцирования можно пояснить, используя следующую аналогию. Представим себе гипотетическую метастабильную среду, способную сильно поляризоваться под воздействием очень малого электрического заряда, и мысленно поместим в нее, в точку Р, такой заряд. Наблюдателю, находящемуся на некотором удалении от Р, может показаться, благодаря наведенной поляризации, что там расположен электрический заряд очень большой величины. Разумеется, при более внимательном изучении электрического поля, он установит, что напряженность поля вблизи Р мала и, возможно, догадается, что регистрируемый электрический заряд не является "настоящим".

Нечто похожее имеет место и в квантовой теории поля, где роль метастабильной среды играет физический вакуум, могущий поляризоваться под воздействием очень малых (в пределе — нулевых!) затравочных зарядов [10,11]. Пожалуй, единственная, но существенная, разница состоит в том, что созданный таким образом заряд следует считать ничуть не менее фундаментальным, чем в любой другой, поскольку физический вакуум, в отличие от материальной среды в предыдущем примере, непосредственно не наблюдаем.

Создание новых зарядов за счет эффектов перестройки вакуума открывает удивительную возможность — "синтезирование" составными системами принципиально новых взаимодействий, не проявляющихся внутри системы, но заметных вне ее. Известный пример такого рода — испускание мезонного поля пучками, внутри которых действуют цветные силы⁵.

По-видимому, нет никаких принципиальных ограничений, запрещающих существование подобных механизмов и на значительно больших масштабах, например, на межмолекулярном уровне. Кроме того, предыдущий опыт развития физики свидетельствует о том, что с каждым относительно устойчивым уровнем

⁴В этой связи, следует сказать, что в поиски отклонений от стандартной теории электрослабых взаимодействий во взаимодействиях органических молекул в разное время были вовлечены как отдельные теоретики, так и целые исследовательские группы. В частности, обращают на себя внимание работы, выполненные в Оксфорде (см., например [8]). Несколько интересных сообщений по биофизике органических молекул опубликовал А. Салам [9], исследованиями такого рода занимается международная коллаборация в Цюрихе.

⁵В настоящее время установлено, что перестройка вакуума в этом случае обусловлена процессом спонтанного нарушения киральной симметрии — механизмом, отличным от того, который был предложен А.Д. Сахаровым. Существуют и другие способы перестройки вакуума, также приводящие к появлению новых зарядов (см., например, [12]).

организации материи (космические тела, атомы, атомные ядра, кварки) связано некоторое, характерное именно для этого уровня, взаимодействие (соответственно — гравитация, электромагнетизм, мезонный обмен, цветное поле). Возможно, что молекулы аминокислот — элементарные кирпичики, из которых построено все живое, в этом смысле не исключение. Наличие внутренней симметрии у элементарных составляющих биологических систем, напоминающей ту, которая встречается в теории элементарных частиц, также следует считать дополнительным аргументом в пользу высказанного предположения. Если взаимодействия, отличные от электромагнитных, действительно проявляются на межмолекулярных расстояниях, они, скорее всего, **должны были** быть задействованы в таких совершенных физических системах, какими являются живые организмы в процессе естественного отбора. Слабость этих взаимодействий по сравнению с электромагнитными, по-видимому, нельзя считать непреодолимым аргументом против возможности их вовлечения в биологические процессы. Так, А. Салам, например, считал, что за отсутствие зеркальной симметрии природных аминокислот ответственны слабые взаимодействия, нарушающие пространственную четность [9]. Конкретная природа этих гипотетических взаимодействий пока не ясна, кроме некоторых самых общих ограничений. Например, понятно, что для того, чтобы исключить притяжение всех молекул мультиплета друг к другу, следует предположить, что переносчиком взаимодействий являются частицы с нечетным спином [13] (например, калибровочные бозоны со спином 1), и т.д.

Понятно, что основная трудность на пути обнаружения новых видов взаимодействий в молекулах органических веществ состоит в отделении эффектов, связанных с относительно тривиальной перестройкой электромагнитного вакуума (эффект Казимира) от других, более интересных, механизмов. Впрочем, может оказаться, что выделить новое взаимодействие не так уж и трудно, если оно окажется более дальнедействующим, чем силы Ван-дер-Ваальса.

Авторы благодарят В.С. Барашенкова и А.Б. Пестова за интересные дискуссии по данному вопросу. Мы также признательны А. Бакасову, предоставившему нам на ряд полезных литературных ссылок.

Литература

1. В.Д. Ляховский, А.А. Болохов. Группы симметрии и элементарные частицы. Ленинград, Изд - во ЛГУ, 1983.
2. Д.П. Желобенко. Компактные группы Ли и их представления. М., Наука, 1970.
3. M.R. Bremmer, R.V. Moody, J. Patera. Tables of Dominant Weight Multiplicities for Representations of Simple Lie Algebras, N.Y., Marcel Dekker, 1985.
4. Физ. энциклоп., М., БРЭ, 1992.
5. Casimir H.V.G. Proc.Kon.Nederl.Akad.Wet..1948.vol.51, p.793.
6. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика, М., Наука, 1980.
7. Casimir H.V.G., Polder D. Phys.Rev.1948.vol.73,p.360.
8. Hinds E.A., Loving C.E., Sandars P.G.H. Phys. Lett., B62 (1976) 97.
9. Salam A. Phys. Lett., B288 (1992) 153.
10. Сахаров А.Д. ДАН СССР, 177 (1967) 70.
11. Сахаров А.Д. ТМФ, 23 (1975) 178.
12. Khare, T. Pradhan, Phys. Lett. B231, 178(1989) 17.
13. S.Weinberg, Phys. Rev., 4 B, (1965) 76.

Рукопись поступила в издательский отдел
23 декабря 1997 года.