

The Investigation of Properties and Theory of Bio-energy Transport in Protein Molecules

^{1,2}Xiaofeng Pang

¹Institute of Life Science and Technology, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu

²International Center for Material Physics, Academia Sinica, Shenyang

Email: pangxf2006@yahoo.com.cn

Received: Mar. 21st, 2011; revised: May 22nd, 2011; accepted: May 23rd, 2011.

Abstract: Bio-energy transport in the living systems is a basic problem for the life science. It is related to transport of the energy released in APT hydrolysis along the protein molecules, and is determined by dynamic properties of the protein molecules. According to the distribution of ATP molecules and its features of hydrolysis and structure properties of protein molecules we proposed a new theory of bio-energy transport in protein molecules based on the difficulties and problems of original Davydov model. In this new model we represented the collective excitation of vibrational quanta of amide-I by a two-quantum quasi-coherent wave function, at the same time, both displacement of amino acid residues arising from the vibration of amide-I and relative displacement of neighboring amino acids caused by resonant interaction between neighboring amides were included in the new Hamiltonian. We obtained that the new soliton transported the bio-energy obtained from the new theory is completely different from Davydov soliton, and thermally stable at biological temperature 300 K, in this case its lifetime is about 10^{-10} second, in which the new soliton can transport over more than one thousand of amino acid residues in protein molecules. This shows that the soliton is possibly a carrier of the bio-energy transport, and can play an important role in biological processes. Therefore, the new theory is available and valuable to bio-energy transport in living science.

Keywords: Protein Molecule; Bio-energy; Transported Theory; Soliton; Nonlinear Theory

生物能量在蛋白质分子中传递的特性和理论研究

^{1,2} 庞小峰

¹ 电子科技大学生命科学技术学院, 成都

² 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳

Email: pangxf2006@yahoo.com.cn

收稿日期: 2011年3月21日; 修回日期: 2011年5月22日; 录用日期: 2011年5月23日

摘要: 生物能量在生物体当中的传递是生命科学其中的一个基本问题, 它关于 ATP 水解放出的能量沿着蛋白质分子的传递, 它与蛋白质的动力学特性相关。根据 ATP 分子水解反应的特性以及蛋白质结构的特点, 在 Davydov 理论的基础上提出了一个新的生物能量传递的理论。在这个理论当中, Amide 的振动的集体激发状态用一个两量子准相干态表示, 系统的哈密顿量不但包含了 Amide 振动引起的相邻氨基酸残基的位移, 而且包含了相邻 Amide 之间的共振相互作用所引起的氨基酸残基的相对位置的改变。由这个理论得出的传递生物能量的孤子在生理温度 300 K 时是热稳定的, 它的寿命可达 10^{-10} 秒, 在这个时间之内孤子能传递过上千个氨基酸残基, 因此它能在生物过程中起着重要的作用。于是, 它是生物体中生物能量传递的一个可利用和正确的理论。

关键词: 蛋白质分子; 生物能量; 传递理论; 孤子; 非线性理论

1. 前言, 理论建立的生物学和物理学基础

何谓生命或生命活动呢? 从生物物理的角度来讲^[1], 它就是生物能量、物质和信息的相互变化、协调和统一的过程。它们有组织、有秩序地综合运动和相互协调变化则是一切生命的基础^[2]。由现代科学得知,

人和一切生命体时刻都不断地从外界吸收大量的物质、能量和信息, 以维持生物自组织和耗散结构, 即维持生命活动。因此, 生物能量与信息的传输和转变则是生命活动的最基本、最主要的过程。人们常将物质、能量、信息讲成生命的三大要素。可以这样说,

物质是生命的基础，能量是生命活动的中心，信息则是生命活动的关键。其生物信息的任何传递都是伴随生物能量的传递而进行的。于是，研究生物能量和生物信息在生命体中的传输的方式，特征和与引起的相关联的生物学过程便就成为生命科学中研究的一个中心问题。

但是生物能量是从何来呢？按生物学和生物化学的理论可知，每天饮进的物质包括食物、水、空气和吸收光，经过各种器官的作用变成人和生命体所需要的葡萄糖等物质。这些物质和吸收的光在细胞质内经过葡萄糖的有氧氧化和无氧氧化及糖酵解等生化过程，除释放一部分生物能量外，大量生成了细胞中的“货币”——ATP 分子(三磷酸腺苷)。再由 ATP 分子的水解为所释放的生物能量^[2,3]。每次反应释放 0.43 eV 的能量为生命活动提供了所需要的能量，它们主要去供给肌肉收缩，神经信息脉冲传递，DNA 的复制，钙泵和钠泵等在正常工作时所需要的能量。在这种情况下，便存在有能量从 ATP 水解的地方传到所需要能量的地方的生物能量传递的问题。那么，这些生物能

量是以怎样的方式和由谁来传递到所需组织的呢？这是生命活动中的一个极其重要的问题。但以前一直是没有人关注它，在所有的教科书都未提到它。其原因是这问题本身就十分复杂，很难用现存的生物学理论讲清。直到 20 世纪 70 年代，由于非线性科学和生命科学的迅速发展，工作在这个交叉领域的前苏联和美国，英国科学家注意到了此问题的重要性，并给予全力研究。在 1973 年首先由前苏联科学家 Davydov^[1,4-6]及其同事提出一个崭新的生物能量传递的孤立子理论，他认为 ATP 水解过程所提供的能量可引起蛋白质分子中的 amide-I(C=O 键)的振动激发，其振动量子 - 激子(大约具有 0.205 eV 或 1666 cm⁻¹的能量)同所引起的分子链的结构畸变(或低频声子)的相互作用而“自陷”成一个孤子。这个孤子和链的畸变一起携带其生物能量和信息沿分子链方向保持能量、动量、波形以及其他准粒子性不变地从一个地方传递到另一处传输过一段宏观距离。他用现代孤立子理论描述了在 α 螺旋蛋白质分子中所形成的生命孤子的特点。并将该个系统的哈密顿量写成。

$$H = H_{ex} + H_{ph} + H_{int} = \sum_n \left[\varepsilon_0 B_n^+ B_n - J(B_n B_{n+1}^+ + B_n^+ B_{n+1}) + \frac{1}{2M} P_n^2 + \frac{1}{2} w(u_n - u_{n-1})^2 + \chi(u_{n+1} - u_{n-1}) B_n^+ B_n \right] \quad (1)$$

由 ATP 水解作用提供的能量而引起的蛋白质分子的集体激发状态用波函数

$$|D_2\rangle = \left[\sum_n \varphi_n(t) B_n^+ |0\rangle_{ex} \right] \left\{ \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \sum_n (R_n(t) P_{na} - \pi_n(t) u_{na}) \right] \right\} |0\rangle_{ph} \quad (2)$$

来表示。其中 $\varepsilon_0 = \hbar\omega_0$ 是一孤立的氨基酸残基中的 amide-I 振子的振动能量， M 是一个氨基酸残基的质量， J 是沿分子链上的两相邻分子间的偶极 - 偶极相互作用能， w 是氢键的弹性系数， χ 是蛋白质中的元激发的激子 - 声子的耦合常数，它表示了由于氢键变化一个单位时所引起的 amide-I 振子的振动频率的改变， B_n^+ 是激子的产生算符； u_n 和 P_n 是氨基酸残基的位置和动量算符。在(1)式中

$H_{ex} = \sum_n \left[\varepsilon_0 B_n^+ B_n - J(B_n B_{n+1}^+ + B_n^+ B_{n+1}) \right]$ 是 amide-I 的振动动能和偶极相互作用能，

$H_{ph} = \sum_n \left[\frac{P_n^2}{2M} + w(u_n - u_{n-1})^2 / 2 \right]$ 是氨基酸残基的谐振能量， $H_{int} = \sum_n \chi(u_n - u_{n-1}) B_n^+ B_n$ 是这两个运动模间的相互作用能。(2)式表示了激子的单粒子激发和声子的相干激发的乘积组合的状态波矢。在连续性近似下，由(1)或(2)式便可得到一个非线性 Schrödinger 方

程，可求得由激子通过与分子的位移耦合而自陷成的 Davydov 孤子的表示式。它承担了传递生物能量和信息的任务。

孤子在生命过程中是十分重要的概念，这是因为它有保持能量、动量不变而运动过一个宏观距离的特性，从而使它能把所吸收的能量和信息无损耗地传递到生物组织中去。这种传递能量和信息的特性是生命体能正常生长的保障和必要条件。因为只有这样，生命体才能正确地接受信息和感觉、也才能对所有“刺激”作出正确的反应。因此生命活动需要孤子，它在生命活动过程中能起到不可替代的重要作用。正因为如此，Davydov 的孤子理论才引起了全世界的科学家们的广泛关注。在他提出此理论后的二十多年间引起了广泛的关注，上百以上的众多科学家如 Scott 等对它的理论基础及准确性，孤子的热稳定与寿命及其它

特性进行了广泛全面深入地研究^[7-25]，并将它用来解释肌肉收缩等多种生理现象，获得了一定成功。理论的研究主要集中在两个方面：一是 Davydov 理论的精确性；二是 Davydov 孤子的热稳定性和理论的实用性。因为所有生命物质包括蛋白质都是处在 300~310 K 左右的温度范围内，所以倍受关注的问题是在生理温度下 Davydov 孤子是否稳定存在，它的寿命是否足够到它能完成传递生物能量和信息的任务，这是 Davydov 理论能否存在的一个关键问题。Lomdahl 等人^[18]通过对 Davydov 方程附加一个涨落项和色散项的办法作数值计算表明，Davydov 孤子在 300 K 时的寿

命太短而无法生存下去。Cottingham 等人^[22-23]用量子力学的微扰理论方法计算了 Davydov 孤子在 300 K 时的寿命仅有 $10^{-12} \sim 10^{-13}$ s，在这段时间内，它只能走过不到十个氨基酸残基的距离，从而失去了生物学意义，因而无法承担传递生物能量与信息的功能。Wang 等人^[20-21]使用蒙特卡罗方法计算了 Davydov 孤子在 300 K 时是不能存在的。仅能在 10 K 以下存在。所以它无多大生物学意义。因此该理论是不成功的。这表明在(1)式中的 Davydov 哈密顿量和在(2)式中的波函数不是非线性 Schrodinger 方程的真正解。在这种情况下，有人把(2)式的 $|D_2\rangle$ 用以下的 $|D_1\rangle$ 波函数代替：

$$|D_1\rangle = \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ |0\rangle_{ex} \times \exp \left[\sum_{nq} [\alpha_{nq}(t) a_q^+ - \alpha_{nq}^*(t) a_q] \right] |0\rangle_{ph} \quad (3)$$

这里 $|0\rangle = |0\rangle_{ex} |0\rangle_{ph}$, a_q^+ (a_q) 是氨基酸残基的声学振动产生的声子的产生(消灭)算符， $\alpha_{nq}(t)$ 和 $\alpha_{nq}^*(t)$ 是一些未知的函数。但这种代替未能改变 Davydov 理论的不足和弱点，即孤子态在生理温度时仍是不稳定的。至此，很多人认为多量子态($n > 2$)波函数可能使孤子态是热稳定的。于是 Brown 等人^[10]提出使用相干态波函数，Kerr 和 Lomdahl 等人^[19]建议使用 $n > 2$ 的多量子波函数，Fröner^[26]和 Crazeiro-Hamsson^[25]等人先后建议用两量子的单粒子激发态波函数等代替 Davydov 理论中的 $|D_2\rangle$ 。但前两者不能保持粒子数守恒而后两者又与 ATP 水解能仅能激发两个量子的实验事实不相符合而被放弃。同时，后者的理论也有不少困难，也未能得到发展。于是，在蛋白质分子中的生物能量传递理论仍是一个未解决的问题。

2. 在蛋白质分子中的新的非线性孤子激发模型

我们认真分析了 Davydov 理论和上述模型弱点和蛋白质结构和集体激发的特点后，认为它们不适合于生物蛋白质分子^[27-32]。如所知，具有生命活力的蛋白质大

分子这一理论是他多年研究的一维分子系统的孤子理论机械地移植到蛋白质分子中来造成的。在中的激子的非线性激发不能应用于蛋白质分子。这是因为后者是由二十种不同氨基酸分子组成的分子长链，每个氨基酸分子又由碳原子、氢原子、氨基和羧基组成。这些分子长链借助于在肽群 H-N-C=O 之间的肽键和相应的氢键折叠成 α -螺旋型的结构。在这种结构中酰胺键 C=O 的伸缩振动是 ATP 分子水解释放的 0.43 eV 的生物能量的接受者。生物蛋白质大分子是不同于如乙酰苯胺分子晶体的一般分子系统，它是一类生物自组织系统^[6]，其中它所具有的集体效应和相互相干特性非常重要。在这种情况下我们既考虑在蛋白质分子中产生的集体激发具有象声子那样的相干性，即我们应该用一个相干态来表示这种集体激发状态。但是也要考虑由 ATP 水解释放的能量仅能激发两个量子的实验事实。在这种情况下我们综合这两个因素，创造性地用一个标准相干态的级数展开式的前三项来表示在蛋白质分子中激子的集体激发状态^[29-32]。于是，把整个蛋白质分子中关于声子和激子激发的波函数表示为

$$|\Phi(t)\rangle = |\varphi(t)\rangle |\beta(t)\rangle = \frac{1}{\lambda} \left[I + \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ + \frac{1}{2!} \left(\sum_n \varphi_n(t) B_n^+ \right)^2 \right] |0\rangle_{ex} \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_n [\beta_n(t) P_n - \pi_n(t) u_n] \right\} |0\rangle_{ph} \quad (4)$$

这里 u_n 和 P_n 是氨基酸残基的位移和动量算符，而 $\varphi(t)$, $\beta_n(t) \leq \Phi(t) |u_n\rangle |\Phi(t)\rangle$ 和 $\pi_n(t) \leq \Phi(t) |P_n\rangle |\Phi(t)\rangle$ 是三个未知的函数， λ 是归一化常数，为了方便，常选择它为 1。

由于每个氨基酸残基具有的 0.8-3.2Daye 的偶极矩，于是我们把由相邻激子激发之间的相互作用导致的相邻氨基酸残基之间的相对位移的改变的相互作用 $x_2(u_{n+1} - u_n)(B_{n+1}^+ B_n + B_n^+ B_{n+1})$ 项加进了原来的 Davy-

dov 哈密顿量(1)式中, 则, 此系统的哈密顿量现为^[29-32]:

$$H = H_{ex} + H_{ph} + H_{int} = \sum_n \left[\varepsilon_0 B_n^+ B_n - J (B_n^+ B_{n+1} + B_n B_{n+1}^+) \right] + \sum_n \left(\frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2} w (u_n - u_{n-1})^2 \right) + \sum_n \left[\chi_1 (u_{n+1} - u_{n-1}) B_n^+ B_n + \chi_2 (u_{n+1} - u_n) (B_n^+ B_{n+1} + B_n B_{n+1}^+) \right] \quad (5)$$

这里 $\varepsilon_0 = \hbar \omega_0 = 1665 \text{ cm}^{-1}$ 是激子的能量(或 C=O 键的伸缩振动能)。系统的耦合系统 $x_1 = \chi$ 和 x_2 分别表征了氨基酸残基发生单位伸长时所导致的激子的特征振动能量和它们之间相互作用能的变化, J 是在相邻 C=O 键之间的偶极-偶极相互作用能。在(4)式中的激

子的集体激发的波函数不再是原来 Davydov 波函数 $|D_2\rangle$ 或 $|D_1\rangle$ 的单粒子激发态, 而是一个相干态, 具体说一个准相干态, 它具有相干的特性, 在 $|\varphi_n(t)| \ll 1$ 时可以写成一个标准的相干态, 即

$$|\varphi(t)\rangle = \left[1 + \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ + \frac{1}{2!} (\varphi_n(t) B_n^+)^2 \right] |0\rangle_{ex} \approx \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_n |\varphi_n(t)|^2 \right] \times \exp \left\{ \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ \right\} |0\rangle_{ex} = \exp \left\{ \sum_n [\varphi_n(t) B_n^+ - \varphi_n^*(t) B_n] \right\} |0\rangle_{ex} \quad (6)$$

于是此波函数是归一化的, 由于此时 $\varphi_n(t)$ 必须满足 $\sum_n |\varphi_n(t)|^2 = 1$, 这个条件 $|\varphi_n(t)| \ll 1$ 对于由几百个氨基酸残基组成的蛋白质分子来讲是自然成立的。故庞的波函数中的激子波函数(4)式和声子部分一样, 也具有相干的特性。于是(4)式的系统波函数就能真实地反

映蛋白质分子中的集体激发的相干性, 同时也是归一化的。但是它不是粒子数算符 $\hat{N} = \sum_n B_n^+ B_n$ 的本征态, 因为 $\hat{N} |\varphi(t)\rangle = 2 |\varphi(t)\rangle - \left[2 + \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ \right] |0\rangle$, 但它却真正包含了两个量子(激子), 即

$$N = \langle \varphi(t) | \hat{N} | \varphi(t) \rangle = \sum_n \langle \varphi(t) | B_n^+ B_n | \varphi(t) \rangle = \left\{ \sum_n |\varphi_n(t)|^2 + \left(\sum_n |\varphi_n(t)|^2 \right) \left(\sum_n |\varphi_n(t)|^2 \right) \right\} = \left(\sum_n |\varphi_n(t)|^2 \right) \left(1 + \sum_m |\varphi_m(t)|^2 \right) = 2 \quad (7)$$

这里

$$\sum_n |\varphi_n(t)|^2 = 1, \quad \sum_m |\varphi_m(t)|^2 = 1, \quad [B_n, B_m^+] = \delta_{nm}$$

因此它满足 ATP 水解释放的能量仅能激发 2 个量子的实验事实, 于是具有好的实验基础。这意味着它不是标准相干态, 故称它为两量子准相干态波函数。这些结果都是系统波函数(4)式的特性。因此, 它是与

其它所有模型不同的新波函数。

从以上系统的波函数和哈密顿量与以下的海森堡

方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Phi(t) | u_n | \Phi(t) \rangle = \langle \Phi(t) | [u_n, H] | \Phi(t) \rangle, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Phi(t) | p_n | \Phi(t) \rangle = \langle \Phi(t) | [p_n, H] | \Phi(t) \rangle$$

可得到声子的运动或 $\beta_n(t)$ 的方程为:

$$M \ddot{\beta}_n(t) = w [\beta_{n+1}(t) - 2\beta_n(t) + \beta_{n-1}(t)] + 2\chi_1 \left[|\varphi_{n+1}(t)|^2 - |\varphi_{n-1}(t)|^2 \right] + 2\chi_2 \left\{ \varphi_n^*(t) [\varphi_{n+1}(t) - \varphi_{n-1}(t)] + \varphi_n^*(t) [\varphi_{n+1}^*(t) - \varphi_{n-1}^*(t)] \right\} \quad (8)$$

从含时的 Schrödinger 方程,

$i\hbar \partial |\Phi\rangle / \partial t = \hat{H} |\Phi(t)\rangle$ 和(4)与(5)式, 可得激子的运动或 $\varphi_n(t)$ 的方程为:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_n(t) = \varepsilon_0 \varphi_n(t) - J [\varphi_{n+1}(t) + \varphi_{n-1}(t)] + \chi_1 [\beta_{n+1}(t) + \beta_{n-1}(t)] \varphi_n(t) - \chi_2 [\beta_{n+1}(t) + \beta_n(t)] \times [\varphi_{n+1}(t) + \varphi_{n-1}(t)]$$

$$+\frac{5}{2}\left(W(t)-\frac{1}{2}\sum_m\left[\dot{\beta}_m(t)\pi_m(t)-\dot{\pi}_m(t)\beta(t)\right]\right)\varphi_n(t) \quad (9)$$

这里

$$W(t)=\langle\beta(t)|H_{ph}|\beta(t)\rangle=\sum_n\left(\frac{1}{2M}\pi_n^2(t)+\frac{1}{2}w[\beta_n(t)-\beta_{n-1}(t)]^2\right)+\sum_q\frac{1}{2}\hbar\omega_q$$

从以上研究可以看出, 在由众多氨基酸残基组成的蛋白质的非线性系统中所产生的激子和声子的运动都是按同一方式处理的, 即都实事求是地根据粒子自身运动的特点, 给出了它们的运动方程, 并彼此相互相关, 共同组成了一个非线性的量子力学系统。这种处理方式是完全不同于量子力学中对微观粒子运动的处理方式。在后者中往往把氨基酸残基组成的晶格系统冻结化, 并用于一个与粒子状态无关的平均场或周

期场作外势场来研究的。这样做完全忽略晶点自身运动的特点。显然这是不符合实际的。于是没有一个非线性相互作用去抑制激子的波动特性, 从而激子运动服从线性 Schrödinger 方程, 而仅具有波动性。因此, 在用非线性量子理论研究多粒子系统时, 所采用的方法是不同于原来量子力学的, 这是应当注意的。

在连续性近似下从(6)~(7)式得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x,t)=R(t)\varphi(x,t)-Jr_0^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x,t)-G_p|\varphi(x,t)|^2\varphi(x,t) \quad (10)$$

和

$$\frac{\partial\beta(x,t)}{\partial\xi}=\frac{\partial\beta(x,t)}{\partial x}=-\frac{4(\chi_1+\chi_2)}{w(1-s^2)r_0}|\varphi(x,t)|^2 \quad (11)$$

这里 $\xi=x-vt$, $s=v/v_0$ 和 $v_0=r_0\sqrt{w/M}$ 是在蛋白质分子链的声速。显然(11)式是一个标准的非线性 Schrodinger 方程。如前所述, 此时方程具有孤子解,

其描述的粒子具有波粒二象性等特性, 而(10)式的孤子解可表示成^[33-34]:

$$\varphi(x,t)=\left(\frac{\mu_p}{2}\right)^{1/2}\operatorname{sech}\left[\left(\mu_p/r_0\right)(x-x_0-vt)\right]\times\exp\left\{i\left[\frac{\hbar v}{2Jr_0^2}(x-x_0)-E_v\frac{t}{\hbar}\right]\right\} \quad (12)$$

$$\mu_p=\frac{2(\chi_1+\chi_2)^2}{w(1-s^2)J}, G_p=\frac{8(\chi_1+\chi_2)^2}{w(1-s^2)} \quad (13)$$

虽然在新模型下的激子和 Davydov 模型的激子都遵守非线性 Schrödinger 方程, 但所得的具体方程是有根本区别的, 即粒子受到的非线性相互作用是不同的。在新模型下, 非线性作用能 G_p 大大大于 Davydov 模型的相应值 G_D 。它们可以表示成:

$$G_p=2G_D\left[1+2(\chi_2/\chi_1)+(\chi_2/\chi_1)^2\right]>G_D \quad (14)$$

相应的孤子振幅值 μ_p 可表示成:

$$\mu_p=2\mu_D\left[1+2(\chi_2/\chi_1)+(\chi_2/\chi_1)^2\right]>\mu_D \quad (15)$$

但在 Davydov 模型中, 则为:

$$G_D=4x_1^2/w(1-s^2), \text{和} \mu_D=x_1^2/w(1-s^2)J$$

由此可知孤子态的局域特性和稳定性大大增加, 和 Davydov 比较起来, 其热稳定性也大大增强, 事实上, 在新模型中的孤子能量为:

$$E=\langle\Phi(t)|H|\Phi(t)\rangle=\frac{1}{r_0}\int_{-\infty}^{\infty}2\left[Jr_0^2\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2+R|\varphi(x,t)|^2-G_p|\varphi(x,t)|^4\right]dx \\ +\frac{1}{r_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}\left[M\left(\frac{\partial\beta(x,t)}{\partial t}\right)^2+wr_0\left(\frac{\partial\beta(x,t)}{\partial t}\right)^2\right]dx=E_0+\frac{1}{2}M_{sol}v^2 \quad (16)$$

其孤子的静止能量为:

$$E_0 = 2(\varepsilon_0 - 2J) - \frac{8(x_1 + x_2)^4}{3w^2J} = E_s^0 - W \quad (17)$$

这里 $W = \left[2(x_1 + x_2)^4\right] / 3w^2J$ 是晶格的畸变能。这孤子态的有效质量为:

$$M_{sol} = 2m_{ex} + \frac{8(x_1 + x_2)^4(9s^2 + 2 - 3s^4)}{3w^2J(1-s^2)^3v_0^2} \quad (18)$$

在此种情况形成的孤子态的结合或束缚能为:

$$E_{BP} = \frac{-8(x_1 + x_2)^4}{3w^2J} = E_{BP} = 8E_{BD} \left[1 + 4\left(\frac{x_2}{x_1}\right) + 6\left(\frac{x_2}{x_1}\right)^2 + 4\left(\frac{x_2}{x_1}\right)^3 + \left(\frac{x_2}{x_1}\right)^4 \right] \quad (19)$$

显然, 在新模型中由激子形成的孤子态的结合能 E_{BP} 比 Davydov 模型中的 $E_{BD} = -\chi_1^2/3Jw^2$ 大多倍。为了具体理解两类不同孤子的特点, 这里采用了 Young 等人^[35]和 Scott 方法^[8], 引入了一个新参数 σ 。在新理论中, 其 σ_p 可表示成: $4\pi\alpha_p = (\chi_1 + \chi_2)^2/2w\hbar\omega_D$, 这

$$J = 1.55 \times 10^{-22} J, \quad w = (13-19.5) N/m, \quad M = (1.71-1.91) \times 10^{-25} kg \\ \chi_1 = 62 \times 10^{-12} N, \quad \chi_2 = (10-18) \times 10^{-12} N, \quad r_0 = 4.5 \times 10^{-10} m. \quad (20)$$

于是可求得其孤子的 $4\pi\alpha_p = 0.11-0.273$ 。这意味着新模型不是弱耦合模型。但对于 Davydov 模型的相应值为 $4\pi\alpha_D = 0.036-0.045$ 。这意味着 Davydov 模型

$$E_{BP}/J = 8(4\pi\alpha_p/\gamma)^2/3, M_{sol} = 2m_{ex} \left[1 + 32(4\pi\alpha_p)^2/3 \right] \quad (21)$$

使用以上数值可求得 $\gamma = 0.08$, 而 E_{BP}/J 作为 $4\pi\sigma$ 的函数关系示在图 1 中。但对于 Davydov 模型的相应值分别为, $E_{BD}/J = (4\pi\alpha_p/\gamma)^2/3, M_{sol} = m_{ex} \left[1 + 2(4\pi\alpha_D/\gamma)^2/3 \right]$, 这里, $4\pi\alpha_D = \chi_1^2/2\omega\hbar\omega_D$, 它们与 $4\pi\sigma$ 的关系示在图 1 中。由此看出 E_{BP} 比 E_{BD} 大约两个数量级。因此, 在庞小峰模型中孤子的局域性和稳定性比 Davydov 模型的大大提高, 于是更加稳定。

事实上, 在新模型中, 与孤子的稳定性相关的非线性相互作用为

$G_p = 8(\chi_1 + \chi_2)^2/(1-s^2)w = 3.8 \times 10^{-21} J$, 它大于色散能 $J = 1.55 \times 10^{-22} J$, 于是, 它不能再被色散。但 Davydov 孤子的相应非线性作用能为:

$$G_D = 4\chi_1^2/(1-s^2)w = 1.18 \times 10^{-21} J$$

它大约小于 G_p 3~4 倍。在新模型中的孤子的束缚能在 300 K 时的值 $E_{BP} = (4.16-4.3) \times 10^{-21} J$, 它既大于色散能 J , 也大于在 300 K 时热扰动能

$$5K_B T/2 = 4.13 \times 10^{-21} J, \text{ 并四倍大于 Debye 能 } K\Theta =$$

里 $\omega_D = \sqrt{w/M}$ 是声学声子的 Debye 频率。研究表明, 若 $4\pi\sigma > 1$ 时, 粒子之间是强耦合相互作用, 在 $4\pi\sigma \ll 1$ 时是弱耦合作用。对于 α -螺旋蛋白质分子, 它的物理参数分别^[1,3-10,27-32]为

是一个弱耦合模型。使用 Venzel 和 Fischer^[36], Nagy 等人^[37]方法, 再引入另一个参数 $\gamma = J/2\hbar\omega$ 。利用这两个参数 σ_p 和 γ , 则孤子的能量与质量可分别表成:

$\hbar\omega_D = 1.2 \times 10^{-21} J$ 。这意味着这个孤子不易被热扰动而被破坏。于是此时形成的微观粒子的孤子态在 300 K 时是热稳定的。但是对于 Davydov 理论其孤子的能量是 $E_{BD} = 0.188 \times 10^{-22} J$, 它是 23 倍小于庞氏理论模

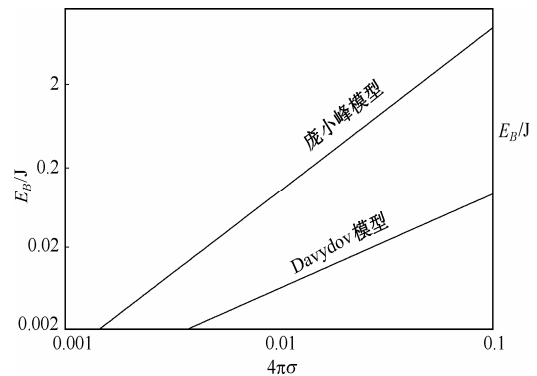


Figure 1. The properties of change of soliton binding energy (E_B) vs. dipole-dipole interaction energy obtained using Pang's model and that of the Davydov model with varying coupled constant, $4\pi\sigma$
图 1. 在我们的模型和 Davydov 模型中的孤子束缚能 E_B 与偶极-偶极相互作用能 J 的比值随耦合常数 $4\pi\sigma$ 的变化特性

型的相应值, 22 倍小于 $K_B T$ 能量, 并小于 $K \Theta 6$ 倍。因此, Davydov 孤子寿命短, 在 300 K 是不稳定的。

以上研究可知, 在蛋白质分子中所激发的激子在和氨基酸分子畸变位移相互作用时产生了非线性相互作用力。靠这个与粒子状态相关的有效势能提供的势阱使激子自陷成一个孤子, 而以经典与量子规律运动, 从而具有波 - 粒二重性。但是, 这种非线性相互作用

不但使激子感受到了, 按照物理学中的作用和反作用定理可知, 此时声子也同时受到了这个非线性相互作用。这一点是很容易证明的。事实上, 在蛋白质中的激子在受到氨基酸分子的非线性相互作用后变成孤子态而被局域。其时, 声子也变成非线性相互作用局域为一粒子。这可从(11)式和(12)式得到这个结论。现将(12)式代入(11)式, 可得到^[33-34]

$$\frac{\partial}{\partial \chi} |\varphi(\chi, t)|^2 = \frac{4\sqrt{2}(\chi_1 + \chi_2)^3}{\gamma_0^3 W (1-s^2)} \left[\beta - \frac{2(1-s^2)^2 W^2}{(\chi_1 + \chi_2)^2} \beta^3 \right] \quad (22)$$

现让(8)式在连续性近似下, 求解, 并代入(22)式, 则可求得:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \beta(\chi, t) - v_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \beta(x, t) = \frac{16(\chi_1 + \chi_2)^2}{M v_0^2 J W (1-s^2)} \left[\beta - \frac{2(1-s^2)^2 W^2}{(\chi_1 + \chi_2)^2} \beta^3 \right] \quad (23)$$

此方程仍属于 ϕ^4 -场方程。众所周知, 它具有孤子群为 $\beta(x, t) = \left[4(\chi_1 + \chi_2) / w(1-s^2) \right] r_0 \tan \left[\mu_p / r_0 (\chi - \chi_0 - vt) \right]$

因此, 该声子也是变为一个孤子, 而被局域化, 具有波粒二象性。从这些研究中可以肯定在非线性作用存在情况下, 不但激子被非线性作用自陷为一个孤子, 而且声子也受非线性作用而变成一个孤子在时空中运动。因此得到, 在非线性系统中由于每个粒子若都受到非线性相互作用而改变其特性, 变为具有波 - 粒二象性的孤子, 它们相互相成, 一起以相同的速度沿蛋白质分子运动。如果声子 - 孤子消失, 则激子 - 孤子也不存在。但是激子 - 孤子和声子 - 孤子的形态和性质是不一样的, 激子 - 孤子是钟形的, 它携带生物能量以行波孤子的形态沿蛋白质分子运动, 但声子 - 孤子是以扭结的形态为激子 - 孤子的运动“开路铺道”。

3. 在生理温度时在蛋白质中的激子 - 孤子态的热稳定性

从以上研究得知, 在蛋白质分子中传递生物能量的

载流子是由激子变成的孤子态后由孤子来完成的。因此孤子可在生命活动中扮演重要作用。这是因为孤子具有在传递过程中能保持其能量、动量和速度等不变的特性, 于是能把生物能量和信息无损失地传到目的地, 从而可保证人和动物等生命体能正确感受到外界的能量和信息的刺激, 也才能把大脑等的信息和能量正确地传到接应的目的地和组织, 以保证正确地感受到环境的刺激, 正确地回应外界作用, 以维持生命体自生的生存。因此, 在生命活动中需要孤子, 孤子能保证生命体的正常生活。但孤子的寿命过短也难完成这些生命过程。因此, 研究这个孤子在 300 K 时的寿命大小就成为一个必须解决的关键问题。如果寿命过短, 在未传递过应该传过的分子链时就消失了, 则就不能承担起传递生物能量的功能。为此, 考查此类孤子的寿命至关重要。现用微扰法来计算此孤子态的寿命。

使用下面变换^[30-32]:

$$u_n = \sum_q \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_q} \right]^{1/2} e^{iqn_0} (a_{-q}^+ + a_q), \quad P_n = i \sum_q \left[\frac{M\hbar\omega_q}{2N} \right]^{1/2} e^{iqm_0} (a_{-q}^+ - a_q) \quad (24)$$

从(5)式可得量子化的哈密顿算符为:

$$\hat{H} = \sum_n \left[\varepsilon_0 B_n^+ B_n - J (B_n^+ B_{n+1} + B_{n+1}^+ B_n) \right] + \sum_q \hbar \omega_q \left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,n} \left[g_1(q) B_n^+ B_n + g_2(q) (B_n^+ B_{n+1} + B_n^+ B_{n+1}) \right] (a_q + a_{-q}^+) e^{im_0 q} \quad (25)$$

这里

$$g_1(q) = 2\chi_1 i \left[\frac{\hbar}{2M\omega_q} \right]^{1/2} \sin r_0 q; \quad g_2(q) = \chi_2 \left[\frac{\hbar}{2M\omega_q} \right]^{1/2} (e^{i\theta_0 q} - 1) \quad (26a)$$

此时(4)式中的声子态的波函数可表示成:

$$U_2 = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_n [\beta_n(t) P_n - \pi_n(t) u_n] \right\} = \exp \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \alpha_q(t) a_q^+ - \alpha_q^*(t) a_q \right\} \quad (26b)$$

这里 $a_q(a_q^+)$ 为氨基酸残基的声学振动产生的量子(声子)的产生(消灭)算符。这里 $\alpha_q(t)$ 和 $\alpha_q^*(t)$ 是 t 的函数。由于我们感兴趣于以初始速度 v 运动的孤子特点, 现让坐标以速度 v 运动, 则这个孤子在这个坐标中是处于静止的。在这个动坐标系中的系统哈密顿量 $\hat{H} = \hat{H} - v\hat{P}$ 这里 \hat{P} 是整个系统的动量, 它可以表成:

$$P = \sum_q \hbar q (a_q^+ a_q - B_q^+ B_q) \quad (27)$$

其中

$$B_q^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{iqm_0} B_n^+ \quad (28)$$

为了得到一个简单的表示式, 现对(25)式作连续性近似, 在其后可表成

$$\begin{aligned} \tilde{H} = \int_0^L dx & 2 \left[(\varepsilon_0 - 2J) \varphi^+(x) \varphi(x) + Jr_0^2 \frac{\partial \varphi^+}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{i\hbar v}{2} \left(\frac{\partial \varphi^+}{\partial x} \varphi(x) - \varphi^+(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right] \\ & + \sum_q \hbar (\omega_q - qv) a_q^+ a_q + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q 2 [g_1(q) + 2g_2(q)] (a_{-q}^+ + a_q) \int_0^L dx e^{ikx} \varphi^+(x) \varphi(x) \end{aligned} \quad (29)$$

这里 $\varphi(x)$ 现应视为相应于算符 B_n 场算符, 让 $L = Nr_0^2, -\pi < kr_0 < \pi$ 和 $\omega_q = \sqrt{w/M} r_0 |q|, x = nr_0$ 。因为孤子的激发总是相伴于氨基酸残基自身的畸变与位移, 在运动和静止坐标系中, 声子粒子的产生和消灭算符具有如下关系:

$$b_q = a_p - \frac{1}{\sqrt{N}} \alpha_q, \quad b_q^+ = a_q^+ - \frac{1}{\sqrt{N}} \alpha_q^*, \quad (30)$$

这里 $b_q(b_q^+)$ 恰好就是此时产生的新声子的消灭(产生)算符。在这种变换下, 新声子的真空态应为:

$$|\tilde{0}\rangle_{ph} = \exp \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q (\alpha_q(t) a_q^+ - \alpha_q^*(t) a_q) \right] |0\rangle_{ph} \quad (31)$$

它是一个相干态, 即 $b_q |\tilde{0}\rangle = 0$, 现完成正则变换:

$$\varphi(x) = \sum_j A_j C_j(x), \quad \varphi^+(x) = \sum_j A_j^+ C_j^*(x) \quad (32)$$

这里 $\int C_1^*(x) C_j(x) dx = \delta_{1j}, \sum_j C_j^*(x') C_j(x) = \delta(x-x'), \int dx |C_j(x)|^2 = 1$

此时的算符 A_s^+ 和 A_k^+ 分别是束缚态 $C_s(X)$ 和扩展态 $C_s(X)$ 的产生算符, 使用(31)~(32)式部分对角化

了哈密顿量(29)式, 它现在为:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = W + E_s A_s^+ A_s + \sum_k E_k A_k^+ A_k + \sum_q \hbar (\omega_q - qv) b_q^+ b_q \\ + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hbar (\omega_q - qv) (b_q^+ \alpha_q + b_q \alpha_q^*) (1 - A_k^+ A_k) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kkq} F(k, k', q) (b_{-q}^+ + b_q) A_k^+ A_k \\ - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kq} \tilde{F}(k, q) (b_{-q}^+ + b_q) (A_s^+ A_{-k} - A_k^+ A_s) \end{aligned} \quad (33)$$

其中,

$$C_s(x) = \left(\frac{\mu_p}{2r_0} \right)^{1/2} \text{sech}(\mu_p x / r_0) \exp[i\hbar x v / 2Jr_0^2], \quad E_s = 2 \left[\varepsilon_0 - 2J - \frac{\hbar^2 V^2}{2Jr_0^2} - \mu_p J \right] \quad (34a)$$

$$C_k(x) = \frac{\mu_p \tanh(\mu_p x / r_0 \mu_p - ikr_0)}{\sqrt{Nr_0} [\mu_p - ikr_0]} \exp[ikx + (i\hbar x v / 2Jr_0^2)], \quad E_k = 2 \left[\varepsilon_0 - 2J - \frac{\hbar^2 V^2}{2Jr_0^2} - J(kr_0)^2 \right] \quad (34b)$$

这里,

$$W = \frac{1}{N} \sum_q \hbar(\omega_q - qv) |\alpha_q|^2, V(x) = \frac{1}{N} \sum_q [g_1(q) + 2g_2(q)] (\alpha_{-q}^* + \alpha_q) e^{iqx}$$

在(33)式中的

$$F(k, k'q) = 2[g_1(q) + 2g_2(q)] \int_0^L dx e^{iqx} C_k^*(x) C_k(x) \approx 2[g_1(q) + 2g_2(q)] \left\{ 1 - \frac{i\mu_q r_0}{[\mu_p + i(k+q)r_0][\mu_p - ikr_0]} \right\} \approx F[k, (k+q), q] \delta_{kk+q} \quad (35a)$$

$$\tilde{F}(k, q) = 2[g_1(q) + 2g_2(q)] \int_0^L dx e^{iqx} C_k^*(x) C_s(x) = \frac{2\pi}{\sqrt{2\mu_p}} [g_1(q) + 2g_2(q)] \left\{ \frac{iqr_0}{\mu_p + ikr_0} \right\} \text{sech}[\pi(k-q)r_0/2\mu_0] \quad (35b)$$

这里 α_q 是由条件: $(w_q - vq)\alpha_q = (w_q + vq)\alpha_q^*$ 来决定的, 这里则在(33)式中的 \tilde{H} 中的 $(1 - A_q A_s)$ 能够决定。于是能得到:

$$\alpha_q(t) = \frac{i\pi(\chi_1 + \chi_2)}{w\mu_p(1 - v^2/v_0^2)} \left[\frac{M}{2\hbar\omega_q} \right]^{1/2} (\omega_q + vq) \text{csch}(\pi q r_0 / 2\mu_p) e^{iqvt} = \alpha_q e^{iqvt} \quad (36)$$

这里: $W = \frac{2}{3} \mu_p^2 J, V(x) = -2J\mu_p^2 \text{sech}^2(\mu_p x / r_0)$ 。

对于(36)式中的 α_q , 在(31)式中的 $|\bar{\sigma}\rangle_{ph}$ 是一个相干声子态。但不同在(35)式中的 $C_k(x)$ (一个非束缚态), 在(35)式中这个束缚态 $C_s(x)$ 是能与分子畸变相自洽的。分子内部激发的自洽态和分子链的畸变的相互作用形成了一个孤子, 它在原参数系统中是稳定的。在(29)式中的哈密顿算符 \tilde{H} 相对于粒子的孤子态 $|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} (A_s^+)^2 |0\rangle_{ex} |0\rangle_{ph}$ 的平均能量为

$$\langle \Phi | \tilde{H} | \Phi \rangle = 2 \left(\varepsilon_0 - 2J - \frac{\hbar^2 v^2}{4Jr_0^2} \right) - \frac{4}{3} J\mu_p^2 \quad (37)$$

$$H_0 = W + E_s A_s^+ A_s + \sum_k E_k A_k^+ A_k + \sum_q \hbar(\omega_q - vq) b_q^+ b_q + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hbar(\omega_q - vq) (\alpha_q b_q^+ + \alpha_q^* b_q) (1 - A_s^+ A_s) \quad (38)$$

$$V_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kk'q} F(k, k+q, q) (b_{-q}^+ + b_q) A_k^+ A_k \quad (39)$$

$$V_2 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kq} \tilde{F}(k, q) (b_{-q}^+ + b_q) (A_s^+ A_k - A_s^+ A_{-k}), V = V_1 + V_2 \quad (40)$$

这里 H_0 描述了在蛋白质中相关准粒子—激子的激发, 即激子—孤子和畸变晶格相关的声子运动, 要移去这种激发, 使畸变的格变成均匀的, 则必须增加 $4J\mu_p^2/3$ 的能量。因此 $4J\mu_p^2/3$ 便是孤子的束缚能, 或者说是激子与孤子之间能隙。因此, 在这种情况下孤子是稳定的。

按照 Schweitzer 等人^[23,22]的方法用量子微扰理论

显然, 在这个孤子态 $|\Phi\rangle$ 中孤子的 \tilde{H} 平均能量应当是等于上面给出的孤子能量 E_{sol} 或说等于在(34)式中束缚态的能量 E_s 和声子畸变能 W 的总和, 即 $|\Phi\rangle \hat{H} |\Phi\rangle = E_{sol} = E_s + W$ 。这是一个感兴趣的结果, 它表明由上述机理形成的准相干激子—孤子是两量子(激子)的自陷态。但是 $|\Phi\rangle$ 不是 \hat{H} 的本征态, 这是由于在 \hat{H} 中存在 $A_k^+ A_s$ 和 $A_s^+ A_{-k}$ 等项的缘故。但因我们仅关心孤子的衰减和寿命, 按 Cottingham 等人^[22,23]的建议可把(33)式中 \hat{H} 分为 $H_0 + V$, 而 $V = V_1 + V_2$, 其中

可计算出由(40)式中的微扰势 V_2 引起的孤子的衰减速率。此时, 应当首先得出包含有 n 个量子的孤子的衰减速率。然后再将它退化为具有两个量子的庞小峰模型中孤子态的衰减速率。在这种情况下, 应把仅包含前三项的(4)式用包含有 $(n+1)$ 项的标准相干态的(6)式代替。于是, 应当首先在有 n 个激发的子空间中计算出此激子的孤子态寿命。

对于以上的哈密顿算符, H_0 的基态现设为 $|n\rangle$, 它包含有 n 个量子,

而 $\left\langle n \left| \sum_n B_n^+ B_n \right| n \right\rangle = \left\langle n \left| \left(A_s^+ A_s + \sum_k A_k^+ A_k \right) \right| n \right\rangle = n$ 。它具有

有的能量 $W + nE_s'$,

在这个子空间中其本征态可表为:

$$|n-m, k_1, k_2, \dots, k_m, \{n_q\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-m)!}} (A_s^+)^{n-m} A_{k_1}^+, A_{k_2}^+, \dots, A_{k_m}^+ |0\rangle_{ex} \prod_q \frac{(d_q^+)^{n_q}}{\sqrt{n_q!}} |\tilde{0}\rangle_{ph}^{n-m}$$

这里

$d_q = b_q + \frac{m}{n} \frac{1}{\sqrt{N}} \alpha_q = a_q - \frac{n-m}{n} \frac{1}{\sqrt{N}} \alpha_q$, n 和 $m (m \leq n)$ 是一些整数, $d_q |\tilde{0}\rangle_{ph}^{n-m} = 0$ 。则相应的系统的能量为:

$$E_{n-m, k_1, \dots, k_m, \{n_q\}}^{(0)} = \left(1 - (m/n)^2\right) W + (n-m) E_s' + \sum_{j=1}^m E_{k_j}' + \sum_q \hbar (\omega_q - \nu q) n_q$$

这里 E_s' 是具有一个量子(激子)束缚态的能量, E_k' 是一个具有非束缚(去局域)态的能量。在 $m=0$ 时, 这个激发态是 n 型孤子态加相应的畸变晶格对应的声子态的复合态。当 $m=n$ 时, 此时激发态是去局域态, 其中声子相应于未畸变的晶格。除去小的 k 值外, 去局域态就是激子态。因此, 孤子在微扰 V_2 的影响下的衰变就相当于从具有能量为

$E_s \{n_q\} = W + nE_s' + \sum_q \hbar (\omega_q - \nu q) n_q$ 的 n 个量子的 n -

型孤子加声子初始态:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \prod_q \frac{(b_q^+)^{n_q}}{(n_q!)^{1/2}} (A_s^+)^n |0\rangle_{ex} |\tilde{0}\rangle_{ph} \quad (41)$$

$$\bar{W} = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \left\{ \sum_{\alpha k} \sum_1 P_1^{(ph)} \left\langle n \left| \exp\left(\frac{iH_0 t''}{\hbar}\right) V_2 \exp\left(\frac{-iH_0 t''}{\hbar}\right) \right| \alpha k' \right\rangle \right. \\ \left. \left\langle \alpha k' \left| \exp\left(\frac{iH_0 t'}{\hbar}\right) V_2 \exp\left(\frac{-iH_0 t'}{\hbar}\right) \right| n \right\rangle \right\} \quad (43)$$

使用一阶量子微扰理论, 可计算出由 V_2 引起的孤子的上述跃迁的几率。此时由(33)式定义的系数 $\tilde{F}(kq)$ 是正比于对局域态和一个去局域态的乘积的积分, 其大小为 $1/\sqrt{N}$ 的数量级。在 $V = V_1 + V_2$ 中的 V_1 刚好表示了去局域的激子和声子的相互作用, 在弱耦合极限 $J\mu_p/K_B T_0 \ll 1$ (T_0 是在后面示出)下, 它的主要作用是修正去局域态的能谱, 从而导致激子和声子的能

向能量为 $E_s \{n_q\} = nE_s' + \sum_q \hbar (\omega_q - \nu q) n_q$ 的去局域激子加未畸变晶格的声子组成的未态:

$$|\alpha k\rangle = \prod_q \frac{(a_q^+)^{n_q}}{(n_q!)} (A_k^+)^n |0\rangle_{ex} |0\rangle_{ph} \quad (42)$$

的跃迁。在 $V = V_1 + V_2$ 中的 V_2 作用下时, 其初态的声子分布是被认为它处在热平衡态中。应用最低阶微扰理论可将这种跃迁的几率写成:

量的移动, 影响孤子的状态。一般来讲, 这种效应较弱, 因此, 在这里不考虑它的影响。

应指出在(43)式中对 l 的求和仅表示相对于具有分布几率为 P_l^{ph} 的畸变晶格的声子初始占据数的求和, 这个 P_l^{ph} 表示对于在给定温度 T 时的声子的平衡分布。使用(38)式和(40)式, 可得到:

$$\bar{W} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\pi^2}{2n\mu_1 N^2} \sum_k \sum_k' [g_1^*(k) + 2g_2^*(k)] [g_1(k'') + 2g_2(k')] \frac{(kr_0)(k'r_0)}{(n\mu_1)^2 + (k'r_0)^2} \operatorname{sech} \left[\frac{\pi r_0}{2n\mu_1} (k - k') \right] \\ \cdot \operatorname{sech} \left[\frac{\pi r_0}{2n\mu_1} (k'' - k') \right] \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \left\{ \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \left(n \left(n^2 - \frac{2}{3} n \right) \mu_1^2 J + nJ(k'r_0)^2 \right) (t' - t'') \right] \right\}$$

$$\times \exp \left[i \sum_q (\omega_q - qv) b_q^+ b_q (t' - t'') \right] \left(b_k^+ + b_{-k} \right) \exp i \sum_q (\omega_q - qv) a_q^+ a_q (t' - t'') \left(b_{-k}^+ + b_k \right) \right\}$$

这里,

$$g_1(k) + 2g_2(k) = 2\chi_1 \left(\frac{\hbar}{2M\omega_k} \right)^{1/2} \left[A(\cos(r_0 k) - 1) + i(A+1)\sin(r_0 k) \right] \approx 2i(A+1)(r_0 k) \chi_1 \left(\frac{\hbar}{2M\omega_k} \right)^{1/2},$$

$$\mu_1 = \frac{\chi_1^2 (1 + A^2)}{\omega(1 - s^2)J}, A = \chi_2 / \chi_1.$$

在上式中的 $\langle \dots \rangle$ 表示了对其中的函数求统计平均值, 这里 $\beta = 1/K_B T$, A 表示了在新模型中的非线性相互作用项对 Davydov 模型的相应值的比值。为了计

算孤子的寿命, 仅感兴趣于在单位时间内的跃迁几率的长时间行为。通过直接的计算, 对于这个平均跃迁几率或衰变速率, 我们得到为:

$$\Gamma_n = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d\bar{W}}{dt} = \frac{2}{n\mu\hbar^2} \frac{\pi^2}{N^2} \sum_{kk'} \left[|g_1(k) + 2g_2(k)|^2 \frac{(r_0 k)^2 \operatorname{sech}^2 \left[\pi(k - k') r_0 / 2n\mu_1 \right]}{(n\mu_1)^2 + (k' r_0)^2} \operatorname{Re} \int_0^\infty dt \right. \\ \left. \left\{ \exp \left[-inJ(k' r_0)^2 + n \left(n^2 - \frac{2}{3}n \right) \mu_1^2 Jt / \hbar + R_0 t + \xi_n(t) \right] \frac{\exp \left[i(\omega_k - kv)t \right]}{\exp \left[\beta\hbar(\omega_k - kv) \right] - 1} \right\} \right] \quad (44)$$

此时

$$R_n(t) = -\frac{1}{n^2 N} \sum_k |\alpha_k|^2 \left\{ i - \exp \left[-i(\omega_k - kv)t \right] \right\}, \xi_n(t) = -\frac{4}{n^2 N} \sum_k \frac{|\alpha_k|^2 \sin^2 \left[\frac{1}{2}(\omega_k - kv)t \right]}{\exp \left[\beta\hbar(\omega_k - kv) \right] - 1}$$

这就是包含 n 个量子的孤子态在一个给定温度时从初始态跃迁到末态的跃迁几率的表示式。从(44)式知道, 式中的 $\Gamma_n, R_n(t), \xi(t)$ 和 $\mu = n\mu_1$ 都随量子数 n 的增加而变化。很明显, 可从它推出在这个新模型(此时

$n=2$)下所形成孤子的跃迁几率和衰变速率。

现首先给出 $R_2(t)$ 和 $\xi_2(t)$ 的显式。在 $v \rightarrow 0$ 和 $\omega_q \rightarrow \sqrt{w/M}$ 的条件下, 利用 Digamma 函数, 在 $t \rightarrow \infty$ 的长时间下, 可将它们表示为:

$$R_2(t) = -R_0 \left[\ln \left(\frac{1}{2} \omega_\alpha t \right) + 1.578 + \frac{1}{2} i\pi \right], \lim_{t \rightarrow \infty} \xi_2(t) = -\eta t, \eta = \pi R_0 / \beta\hbar = \pi R_0 k_B T / \hbar$$

$$R_0 = \frac{4(\chi_1 + \chi_2)^2}{\pi\hbar w} (M/w)^{1/2} = \frac{2J\mu_p r_0}{\pi\hbar v_0}, \omega_\alpha = \frac{2\mu_p}{\pi} \left(\frac{w}{M} \right)^{1/2}, T_0 = \hbar\omega_\alpha / K_B$$

在计算中使用 $\coth(w_\theta t / 2) \approx 1$ 的条件。

$R_0 T / T_0 < 1$ 的关系。在这种情况下, 新模型中的两量子的孤子的衰变速率为:

对于给定的蛋白质分子, 这里有 $R_0 < 1, T_0 < T$ 和

$$\Gamma_2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d\bar{W}}{dt} = \frac{2}{\mu_p} \frac{\pi^2}{N^2} \sum_{kk'} \frac{(kr_0) |g_1(k) + 2g_2(k)|^2 \operatorname{sech}^2 \left[(\pi r_0 / 2\mu_p)(k - k') \right]}{\left[\mu_p^2 + (k' r_0)^2 \right] \left[\exp(\beta\hbar\omega_k) - 1 \right]} (2.43\omega_\alpha)^{-R_0}$$

$$\left\{ \frac{\left(\eta^2 + \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k' r_0)^2 J - \hbar\omega_k \right]^2 \right)^{(1+R_0)/2}}{\hbar^2 \eta^2 + \left[\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k' r_0)^2 J - \hbar\omega_k \right]^2} \right\} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\frac{R_0 \pi}{2} + (1 - R_0) \left[\frac{\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k' r_0)^2 J - \hbar\omega_k}{\hbar \eta} \right]^2 \right] \right\} \quad (45)$$

它是明显不同于由 Cottingham 等人^[22,23]求出的包含一个量子的 Davydov 孤子的衰变速率:

$$\Gamma_D = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\chi_1^2}{\mu_D} \left(\frac{2\pi}{N} \right)^2 \sum_{kk'} \left(\frac{\hbar}{2M\omega_k} \right) \frac{(kr_0)^2 \sin^2(kr_0) \operatorname{sech}^2 \left[(\pi r_0 / 2\mu_D)(k-k') \right]}{\left[\mu_D^2 + (k'r_0)^2 \right] \left[\exp(\beta \hbar \omega_k) - 1 \right]} \left(\frac{\omega_\alpha^D}{\eta_D} \right)^{-R_0^D} \times \frac{\hbar^2 \eta_D}{\hbar^2 \eta_D^2 + \left[J\mu_D^2 / 3 + J(k'r_0)^2 - \hbar \omega_k \right]} \quad (46)$$

这里 $\eta_D = \pi R_0^D K_B T / \hbar$, $R_0^D = \frac{2\chi_1^2}{\pi \hbar W} \left(\frac{M}{w} \right)^{1/2}$, $\omega_\alpha^D = \frac{2\mu_D}{\pi} \left(\frac{M}{w} \right)^{1/2}$ 。若相比较, 可发现在(45)式中增加了一个附加的因子:

$$\left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\frac{R_0 \pi}{2} + (1 - R_0) \left[\left(\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k'r_0)^2 J - \hbar \omega_k / \hbar \eta \right) \right] \right]^2 \right\}$$

并且在(46)式中的因子 $\left(\frac{\omega_\alpha}{\eta_D} \right)^{-R_0^D}$ η_D 是用在(45)式中的:

$$(2.43\omega_d)^{-R_0} \cdot \left(\eta^2 + \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k'r_0)^2 J - \hbar \omega_k \right]^2 \right)^{(1+R_0)/2}$$

所代替。不同于 Davydov 模型, 在新模型中的 η , R_0 和 T_0 不再是一个小数。使用上面给出的蛋白质分子的参数值, 可求出在 300 K 时的 $\eta_p = 6.257 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $R_0 = 0.629$, $T_0 = 294 \text{ K}$ 。但在 Davydov 模型中, $\eta_D = 2.006 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $R_0 = 0.16$, $T_0 = 95 \text{ K}$ 。因此, 它们是大大小于新模型中的相应值。于是孤子的寿命也会迥然不同。这是由于新模型中的 G_p 和 μ_p 大于 Davydov 模型的相应值 3 倍造成的。使用前面给出的可广泛接受的 α -螺旋蛋白质分子的参数值(20)式, 可求出孤子在生理温度 300 K 时的寿命 $\tau = 1/\Gamma_2$ 。当波矢处于第一布里渊区和 $v = 0.2v_0$ 时, 能求出新模型的 Γ_2 的值是 $1.54 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 到 $1.80 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 。于是孤子的寿命 τ_2 为 $0.53 \times 10^{-10} \text{ s}$ 到 $0.65 \times 10^{-10} \text{ s}$, 或者

$\tau/\tau_0 = 510 - 600$, 这里 $\tau_0 = r_0/v_0$ 它表示是如果孤子以声速 v_0 传播时, 则它在传播过 1 个晶格空间时所用的时间就是 $\tau_0 = \sqrt{M/w}$ 。但在 Davydov 理论中, $\tau/\tau_0 < 10$ 。这表明 Davydov 孤子在以声速传递时, 也只能传递过不足 10 个氨基酸残基。由于一般蛋白质是由 100 到几百个氨基酸分子组成, 一般认为具有 $\tau/\tau_0 > 500$ 的载流子是具有生物学意义的标准, 即能充当传递生物能量的任务。因此, Davydov 孤子是无生物学意义的。但新模型中的孤子在生理温度时可传递过 600 多个氨基酸分子, 即它有一个较长的寿命, 因此具有重要的生物功能。从而可判定新模型是适合于蛋白质分子的。

但是, 上述孤子的寿命是与温度有关的。显然, 当温度升高时, 由于热的无序扰动的增加, 也增加了孤子向去局域的裸激子态的跃迁, 从而使它的寿命减少。在图 2 中给出了新模型中的孤子寿命 τ/τ_0 随温度的改变。从图看到, 此孤子的寿命随温度的上升高以近指数的衰减。但在 310 K 的高温时, 这孤子仍有足够长的寿。因此, 这新孤子可称得上是生物能量的真正载流子。为了和 Davydov 模型比较, 在图 3 中示出了庞模型和 Davydov 模型下的孤子的寿命的对数 $\log(\tau/\tau_0)$ 随温度的变化。从图可见, 新模型中的孤子的寿命高于 Davydov 孤子寿命近 2 个数量级, 因此, 新模型真正优于 Davydov 模型。

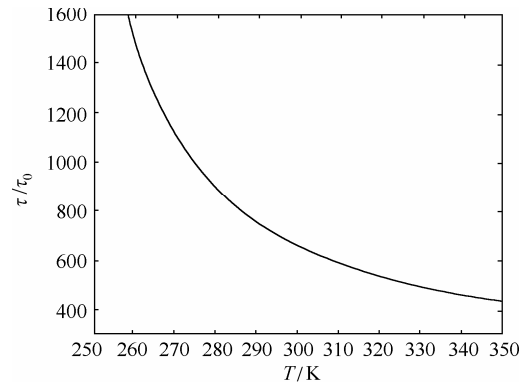


Figure 2. The Changes of relative value of soliton lifetime, τ/τ_0 , with varying temperature T in α -helical protein molecules in new model

图 2. 在新模型和 α -螺旋蛋白质分子中的孤子相对寿命 τ/τ_0 随温度的变化

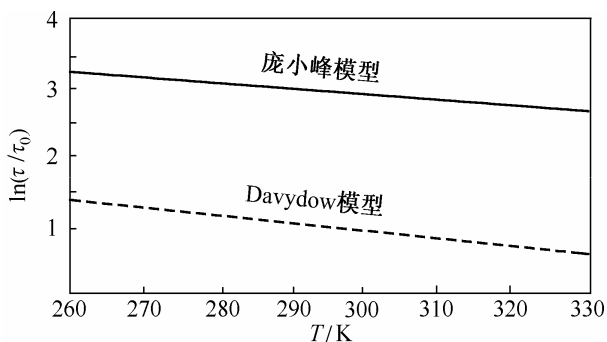


Figure 3. $\log(\tau/\tau_0)$ versus the temperature for the soliton in the new model and Davydov model

图3. 在新模型和 Davydov 模型中孤子态的相对寿命 τ/τ_0 的对数值随温度的变化

4. 结论

如所知, 由 ATP 水解反应所释放的生物能量沿着蛋白质分子的传递是生命科学中的一个基本问题。这种传递与蛋白质的动力学特性有关, 并是一个非线性问题。但是, 早期的 Davydov 理论存在许多问题和困难, 必须向前发展。根据 ATP 分子水解反应的特性以及蛋白质结构的特点, 在 Davydov 理论的基础上我们提出了一个新的生物能量传递的理论。在这个理论当中, Amide 的振动的集体激发状态用一个两量子准相干态表示, 系统的哈密顿量不但包含了 Amide 振动引起的相邻氨基酸残基的位移, 而且包含了相邻 Amide 之间的共振相互作用所引起的氨基酸残基的相对位置的改变。从而彻底克服了 Davydov 理论存在的诸多问题和困难。我们用新的非线性量子理论和孤子理论, 从这个新理论得出的传递生物能量的孤子在生理温度 300 K 时是热稳定的, 它的寿命可达 10^{-10} 秒, 在这个时间之内孤子能传递过上千个氨基酸残基, 因此它能在生物过程中起着重要的作用。于是, 它是生物体中生物能量传递的一个可利用和正确的理论。

5. 致谢

本文作者感激国家重大基础研究“973”项目的财政支持, 基金编号: 212011CB503701。

参考文献 (References)

[1] J. A. S. Davydov. The theory of contraction proteins under their excitation. *Journal of Theoretical Biology*, 1973, 38(3): 559-569.
 [2] A. S. Davydov. *Biology and quantum mechanics*. New York: Pergamon, 1982: 46-169.
 [3] 庞小峰. 生物物理学[M]. 成都: 电子科技大学出版社, 2007:

158-254.
 [4] A. S. Davydov. Solitons in molecular systems. *Physica Scripta*, 1979, 20(3-4): 387-394.
 [5] A. S. Davydov. The lifetime of molecular solitons. *Journal of Biological Physics*, 1991, 18(2): 111-125.
 [6] A. S. Davydov. *The solitons in molecular systems*. Dordrecht: Reidel, 1991.
 [7] A. C. Scott. Dynamics of Davydov's soliton. *Physical Review A*, 1982, 26(1): 578-595.
 [8] A. C. Scott. Davydov's soliton. *Physics Report*, 1992, 217(1): 1-66.
 [9] D. W. Brown, Z. Ivic. Unification of polaron and soliton theories of exciton transport. *Physical Review B*, 1989, 40(14): 9876-9887.
 [10] D. W. Brown, B. J. West, and K. Lindenberg. Nonlinear density-matrix equation for the study of finite-temperature soliton dynamics. *Physical Review B*, 1987, 35(12): 6169-6181.
 [11] X. F. Pang. The properties of bio-energy transport in protein molecules. *Chinese Journal Biochemistry and Biophysics*, 1986, 18(1): 1-7.
 [12] X. F. Pang. The features of Davydov soliton excited in protein molecules. *Chinese Journal Atom Molecular. Physics*, 1986, 6(2): 275-284.
 [13] P. L. Christiansen, A. C. Scott. *Self-trapping of vibrational energy*. New York: Plenum Press, 1990: 15-345.
 [14] L. Cruzeiro-Hansson. Two reasons why the Davydov soliton may be thermally stable after all. *Physical Review Letters*, 1994, 73(21): 2927-2930.
 [15] L. Cruzeiro-Hansson. Mechanism of thermal destabilization of the Davydov soliton. *Physical Review A*, 1992, 45(6): 4111-4115.
 [16] W. Förner. Quantum and disorder effects in Davydov soliton theory. *Physical Review A*, 1991, 44(4): 2694-2708.
 [17] W. Förner. Quantum and temperature effects on Davydov soliton dynamics: Averaged Hamiltonian method. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1992, 4(8): 1915-1923.
 [18] P. S. Lomdahl, W. C. Kerr. Do Davydov solitons exist at 300 K?. *Physical Review Letters*, 1985, 55(11): 1235-1238.
 [19] W. C. Kerr, P. S. Lomdahl. Quantum-mechanical derivation of the equations of motion for Davydov solitons. *Physical Review B*, 1987, 35(7): 3629-3632.
 [20] X. Wang, D. W. Brown, and K. Lindenberg. Quantum Monte Carlo simulation of Davydov model. *Physical Review Letters*, 1989, 62(15): 1796-1799.
 [21] X. Wang, D. W. Brown, and K. Lindenberg. Alternative formulation of Davydov theory of energy transport in biomolecules systems. *Physical Review A*, 1988, 37(9): 3557-3566.
 [22] J. P. Cottingham, J. W. Schweitzer. Calculation of the lifetime of a Davydov soliton at finite temperature. *Physical Review Letters*, 1989, 62(15): 1792-1795.
 [23] J. W. Schweitzer. Lifetime of the Davydov soliton. *Physical Review A*, 1992, 45(12): 8914-8922.
 [24] J. M. Hyman, D. W. McLaughlin, and A. C. Scott. On Davydov's alpha-helix solitons. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1981, 3(1-2): 23-44.
 [25] A. F. Lawrence, J. C. McDaniel, D. B. Chang, et al. Dynamics of the Davydov model in alpha-helical proteins: Effects of the coupling parameter and temperature. *Physical Review A*, 1986, 33(2): 1188-1201.
 [26] W. Förner. Davydov soliton dynamics: Two-quantum states and diagonal disorder. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1991, 3(19): 3235-3254.
 [27] X. F. Pang. The properties of collective excitation in organic protein molecular system. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1990, 2(48): 9541-9552.
 [28] X. F. Pang. Comment "the thermodynamic properties of α -hili protein, a soliton approach". *Physical Review*, 1994, 49(5): 4747-4751.
 [29] X. F. Pang. Influence of the soliton in anharmonic molecular crystals with temperature on Mossbauer Effect. *Eupopean Physical Journal B*, 1999, 10(3): 415-428.

- [30] 庞小峰. 非线性量子理论[M]. 重庆: 重庆出版社, 1994: 233-293.
- [31] X. F. Pang. An improvement of the Davydov theory of bio-energy transport in the protein molecular systems. *Physical Review E*, 2000, E62(5): 6989-6998.
- [32] X. F. Pang, Y. P. Feng. *Quantum mechanics in nonlinear systems*. New Jersey: World Science Publishing Co., 2005: 471-551.
- [33] 庞小峰. 孤子物理学[M]. 成都: 四川科技出版社, 2003: 485-524.
- [34] 郭柏灵, 庞小峰. 孤立子[M]. 北京: 科学出版社, 1987: 10-45.
- [35] E. Young, P. B. Shaw, and G. Whitfield. Asymptotic spectrum of momentum eigenstates of one-dimensional polarons. *Physical Review B*, 1979, 19(2): 1225-1229.
- [36] G. Venzl, S. F. Fischer. Improvement of the Davydov theory of bioenergy transport in protein molecular systems. *The Journal of Physical Chemistry*, 1984, 81(11): 6090-6095.
- [37] J. F. Nagle, M. Mille and H. J. Morowitz. Dynamics of ionic defects and lattice soliton in thermalized hydrogen-bonded chain. *The Journal of Physical Chemistry*, 1980, 72(7): 3959-3971.